

THESIS / THÈSE

MASTER EN SCIENCES INFORMATIQUES

Système de génération interactif des coordonnées nucléaires de molécules et de polymères

Schepens, Marc

Award date:
1979

Awarding institution:
Université de Namur

[Link to publication](#)

General rights

Copyright and moral rights for the publications made accessible in the public portal are retained by the authors and/or other copyright owners and it is a condition of accessing publications that users recognise and abide by the legal requirements associated with these rights.

- Users may download and print one copy of any publication from the public portal for the purpose of private study or research.
- You may not further distribute the material or use it for any profit-making activity or commercial gain
- You may freely distribute the URL identifying the publication in the public portal ?

Take down policy

If you believe that this document breaches copyright please contact us providing details, and we will remove access to the work immediately and investigate your claim.

181
FM B 16 / 19 79 / 6

SYSTÈME DE GÉNÉRATION INTERACTIF
DES COORDONNÉES NUCLÉAIRES
DE MOLÉCULES ET DE POLYMÈRES.

*Mémoire présenté pour l'obtention
du grade de "Licencié et Maître
en Informatique"*

par

MARC SCHEPENS

- 1979 -

FACULTES
UNIVERSITAIRES
N.-D. DE LA PAIX
NAMUR

Bibliothèque

FM B16

1979/6

*J'exprime ma gratitude envers
Messieurs les Professeurs J.M. André et
J. Delhalle pour m'avoir permis de mener
ce travail à bien dans les meilleures
conditions.*

*Je remercie le frère Robert
Graas pour le soutien et l'intérêt appor-
tés à l'élaboration de ce travail.*

6520-27003



lbs 3212513

TABLE DES MATIERES

I. Introduction.

II. Configuration du système.

III. Structure générale de l'Interface.

III. 1. Logique

III. 2. Implémentation

III. 3. Algorithme général du module principal

IV. Calcul des coordonnées cartésiennes d'une molécule.

IV. 1. Introduction

IV. 2. Principe

IV. 3. Présentation des données

IV. 4. Analyse Mathématique

IV. 5. Programmation

IV. 6. Test de Stabilité

IV. 7. Exemples

V. Coordonnées cartésiennes de polymères hélicés périodiques.

V. 1. Introduction

V. 2. Cas des chaînes diatomiques hélicées

V. 3. Idéalisation de la molécule

V. 4. Test de stabilité

V. 5. Exemples

VI. Modules de contrôles

VI. 1. Introduction

VI. 2. Option "COORDINATE"

VI. 3. Option "DISTANCE"

VI. 4. Option "BOND ANGLE"

VI. 5. Option "DIHEDRAL ANGLE"

VI. 6. Option "IN PLANE"

VII. Modules de Dessin.

- VII. 1. Introduction
- VII. 2. Option "SCALE"
- VII. 3. Option "SCREEN MOLECULE"
- VII. 4. Option "SCREEN ATOMS"
- VII. 5. Option "TRANSLATION OF AXES"

VIII. Rotation et Translation de la molécule.

- VIII. 1. Introduction
- VIII. 2. Translation
- VIII. 3. Rotation : - Option "MOLECULE"
- Option "GROUP"

IX. Les Entrées et les Sorties.

Appendice A : Les Principales variables et leur signification.

Appendice B : Structure de l'overlay.

*Appendice C : Remarques à propos de l'action :
"Attendre le choix de l'utilisateur".*

Appendice D : Les identificateurs d'image utilisés.

Bibliographie.

Listing du programme et des sous-routines.

CHAPITRE I INTRODUCTION.

Beaucoup d'études en chimie nécessitent comme données de base les coordonnées cartésiennes de molécules. Tel est le cas pour les études conformationnelles, la simulation de spectres NMR, le calcul des propriétés électroniques des molécules, ...

Ces données sont introduites dans des programmes orientés calculs qui prennent plusieurs dizaines de minutes CPU et plus. Or l'étape de génération des coordonnées moléculaires est souvent une source de problèmes. Les erreurs peuvent être coûteuses, surtout dans le cas de grandes molécules car ces erreurs ne seront décelées qu'à la fin de leur traitement sur ordinateur.

Il est donc essentiel de créer un système général de contrôle des coordonnées. L'objet du mémoire est de construire un interface entre un utilisateur qui veut vérifier la cohérence chimique des coordonnées cartésiennes d'une molécule et un système informatique qui comprend un écran graphique. Cet interface devra présenter certaines qualités telles que :

- simplicité : un minimum de données devront être introduites;
- facilité de communication entre l'application et l'utilisateur;
- clarté des commentaires et des "menus" présentés à l'écran;
- précision : les résultats doivent être aussi précis que possible;
- souplesse : facilement modifié et étendu;
- visualisation claire et explicite de la molécule à l'écran graphique sans toutefois surcharger l'écran.

CHAPITRE II CONFIGURATION DU SYSTEME.

L'équipement comprend :

- un ordinateur PDP 11/45 possédant un processeur et une mémoire de 64 K mots ($K = 1024$)
- trois unités à disques
- deux armoires à bande magnétique
- un lecteur de cartes
- une imprimante
- trois terminaux conversationnels
- un traceur de courbe Benson
- un display interactif GT 42

Le système d'exploitation est la version RSX-11M qui est un système en temps réel.

Le compilateur est un compilateur fortran.

CHAPITRE III STRUCTURE GENERALE DE L'INTERFACE.

Cet interface particulier doit donc mettre à la disposition des utilisateurs plusieurs modules : un module de génération de coordonnées cartésiennes, des modules d'entrées et de sorties, des modules de rotation et de translation de la molécule, des modules de contrôle des coordonnées, des angles, des angles dièdres et des distances d'un point à un plan, des modules de visualisation de la molécule sur écran graphique, ... Tous ces modules pouvant être appelés à tout moment sur décision de l'utilisateur.

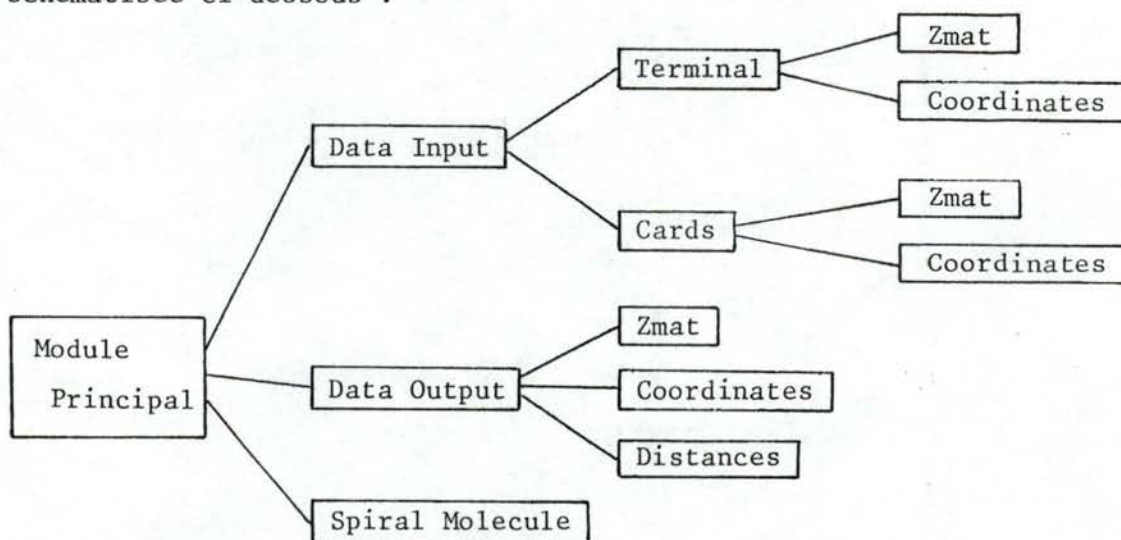
III. 1. Point de vue logique :

Nous décomposons ce problème en sous-problèmes de la manière suivante :

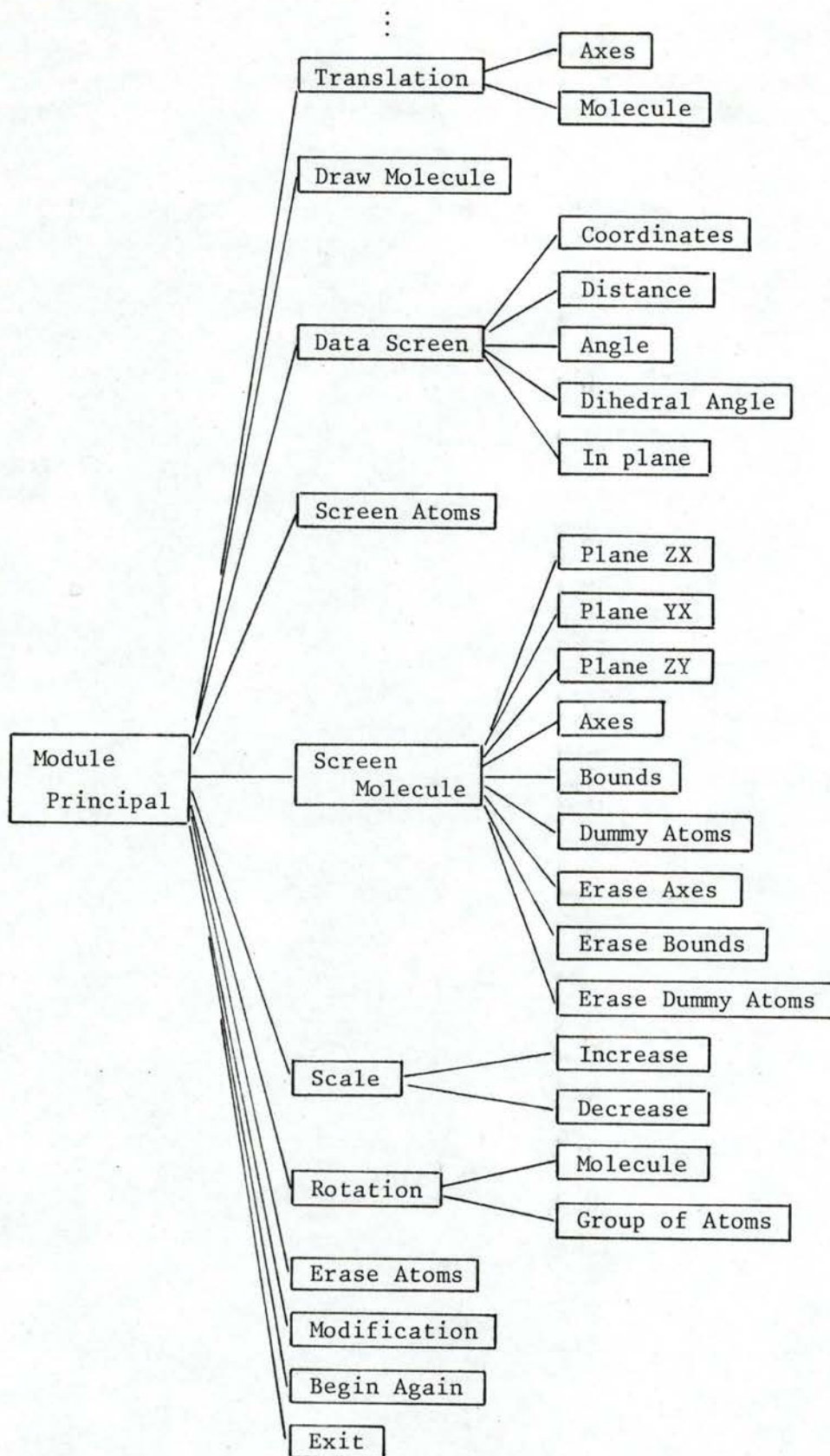
nous créons un module principal qui a pour fonction :

- de présenter sur l'écran un "menu" qui expose les principaux modules dont dispose l'utilisateur pour résoudre son problème.
- d'enregistrer la décision de l'utilisateur.
- d'appeler le module correspondant à la demande.

Un module appelé peut à son tour offrir de nouvelles options plus détaillées et appeler d'autres modules. Nous retrouvons la structure arborescente schématisée ci-dessous :



⋮

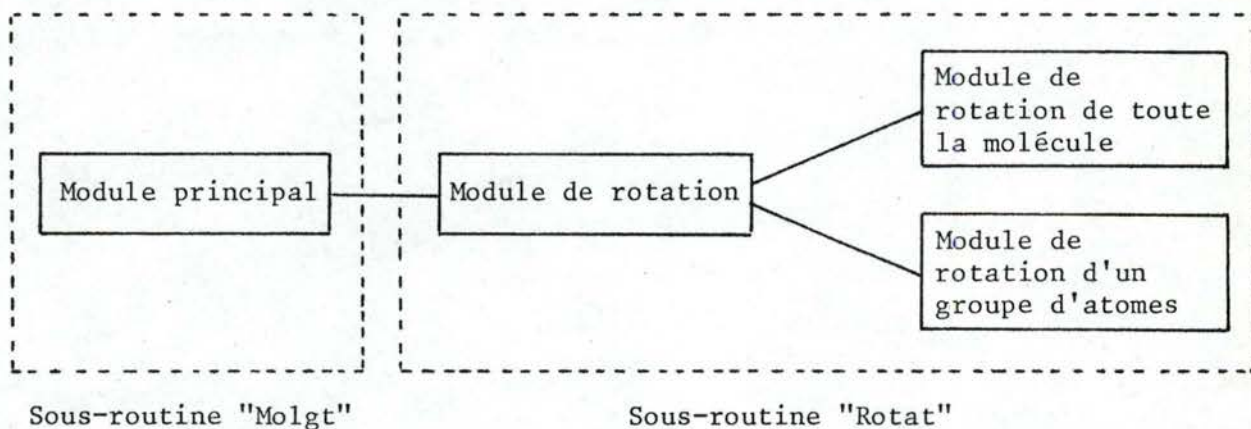


Il faut maintenant définir les actions effectuées par chacune des feuilles de l'arbre.

Notons que l'initiative est entièrement laissée à l'utilisateur qui peut à tout moment appeler n'importe quel module directement descendant ou ascendant. Cette structure permet d'ajouter ou de retirer aisément des modules.

III. 2. Point de vue implémentation :

Plusieurs modules ayant des caractéristiques voisines sont rassemblés dans une seule sous-routine. Par exemple :



Chaque fois qu'un module modifie les coordonnées cartésiennes ou le nombre d'atomes dans la molécule, l'image à l'écran est remise à jour. Ceci implique des appels à des modules de visualisation et de calcul de coordonnées cartésiennes qui sont transparents à l'utilisateur.

La structure physique de l'interface est donnée par le graphe ci-dessous où les sommets représentent les sous-routines et les arêtes les appels entre sous-routines. Les arêtes non orientées sont transparentes à l'utilisateur.

Toutes les données importantes telles que les coordonnées de la molécule, la matrice des liaisons, les longueurs de liaisons, les angles entre liaisons, les angles dièdres, l'échelle de l'écran, ... sont regroupés dans des zones COMMON. Ces données sont gérées par les sous-routines.

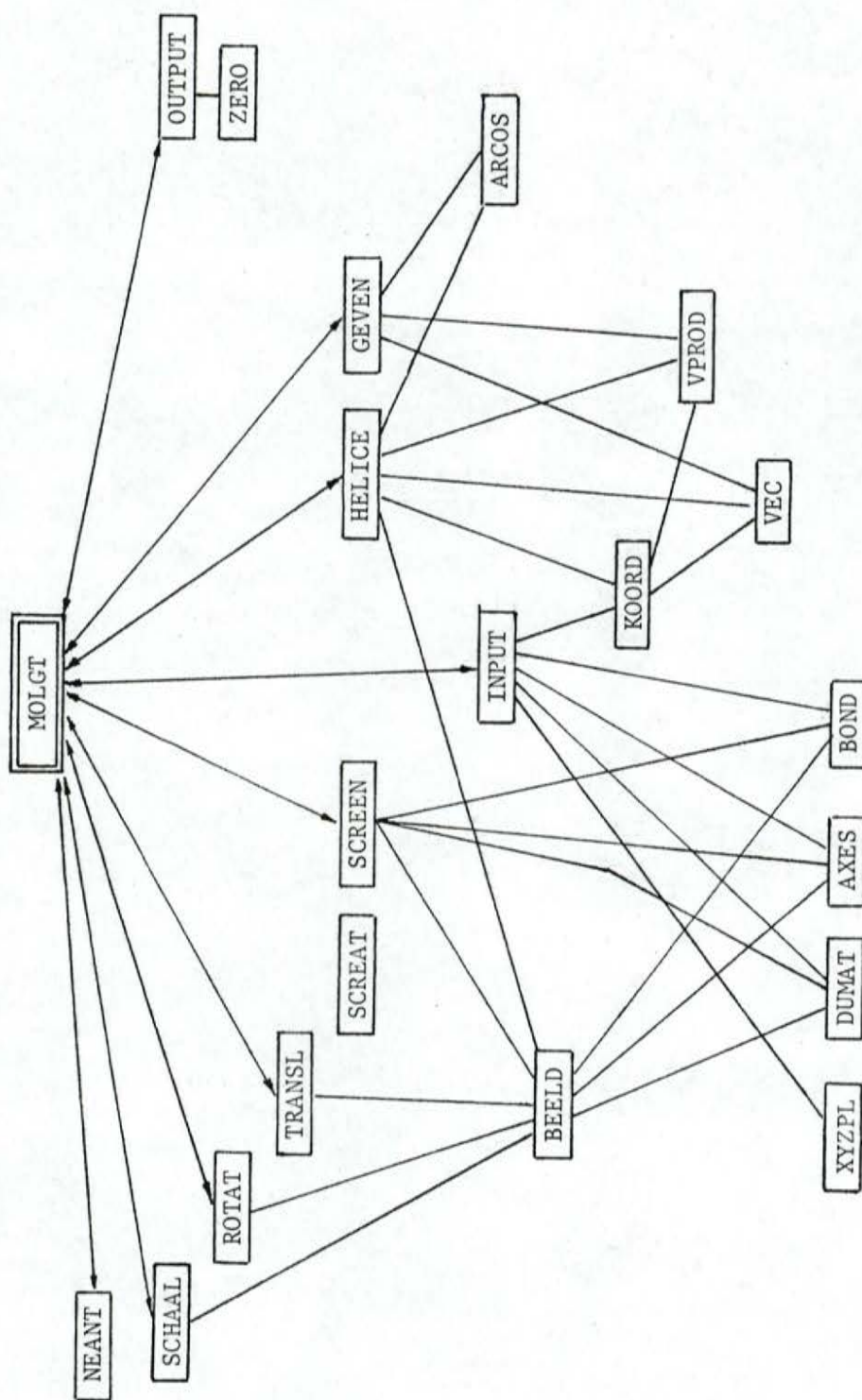
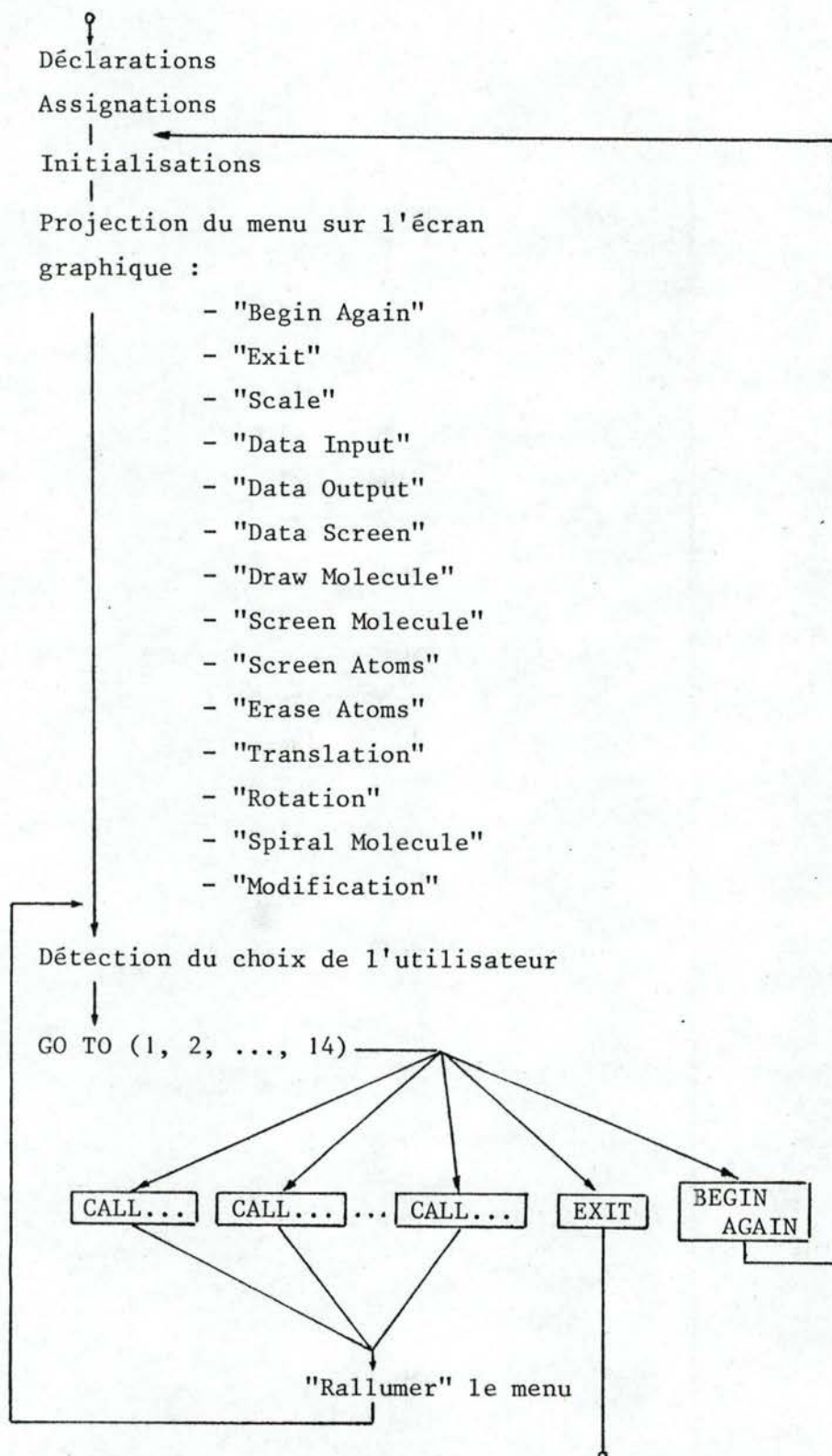


Fig. 1 : Structure physique de l'interface.

III. 3. Algorithme général du module principal.



CHAPITRE IV CALCUL DES COORDONNEES CARTESIENNES D'UNE MOLECULE.

IV. 1. Introduction :

En chimie, une molécule est géométriquement caractérisée par la longueur des liaisons chimiques, les angles formés par deux liaisons adjacentes et les angles dièdres entre trois liaisons adjacentes. Connaissant toutes ces caractéristiques pour une molécule donnée, il est possible de déterminer les coordonnées cartésiennes de chaque atome de la molécule. Un atome est assimilé à un point dans un système de référence droitier.

IV. 2. Principe :

Les coordonnées cartésiennes d'un atome sont déterminées à partir des coordonnées cartésiennes d'un atome déjà connu et de ses caractéristiques : longueur de liaison avec cet atome connu, un angle de liaison avec un troisième atome connu et un angle dièdre avec un quatrième atome connu également.

Soit J un atome dont on connaît les coordonnées :

Les coordonnées de l'atome I sont données par :

$$\begin{pmatrix} X_I \\ Y_I \\ Z_I \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} X_J \\ Y_J \\ Z_J \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \Delta X_{IJ} \\ \Delta Y_{IJ} \\ \Delta Z_{IJ} \end{pmatrix}$$

où ΔX_{IJ} , ΔY_{IJ} , ΔZ_{IJ} sont fonctions des caractéristiques de l'atome recherché.

IV. 3. Présentation des données :

Deux options sont offertes : l'utilisateur introduit ses données soit par cartes soit par terminal. Dans ce dernier cas il suffit de répondre aux questions apparaissant au terminal. Les données introduites sont les mêmes que celles par cartes. Dans le premier cas il procède comme suit :

1ère carte : titre (70 caractères).

2ème carte : numéro atomique du premier atome dont on cherche les coordonnées (format I 3).

3ème carte : - numéro atomique du deuxième atome.
 - le numéro de séquence de l'atome auquel ce deuxième atome est lié c-à-d 1 (format I 4).
 - la distance entre le premier et le deuxième atome (format G 7.4).

4ème carte : - le numéro atomique du troisième atome.
 - le numéro de séquence de l'atome auquel le troisième atome est lié (soit 1, soit 2).
 - la distance entre le troisième atome et l'atome auquel il est lié.
 - le numéro de séquence de l'autre atome qui formera un angle (format I 4).
 - l'angle formé par les trois atomes (format G 11.4)

Et pour chaque atome I suivant, la carte contiendra :

- le numéro atomique de l'atome I dont on cherche les coordonnées (format I 3).
- le numéro de séquence de l'atome J auquel l'atome I est lié (format I 4).
- la distance entre les atomes I et J (format G 7.4).
- le numéro de séquence d'un atome K qui formera un angle α avec J et I (format I 4).
- l'angle α formé par les trois atomes I J K (format G 11.4).
- le numéro de séquence d'un dernier atome L pour former le plan L K J (format I 4).
- l'angle dièdre β entre les plans L K J et K J I (format G 11.4).

Dernière carte : End of File.

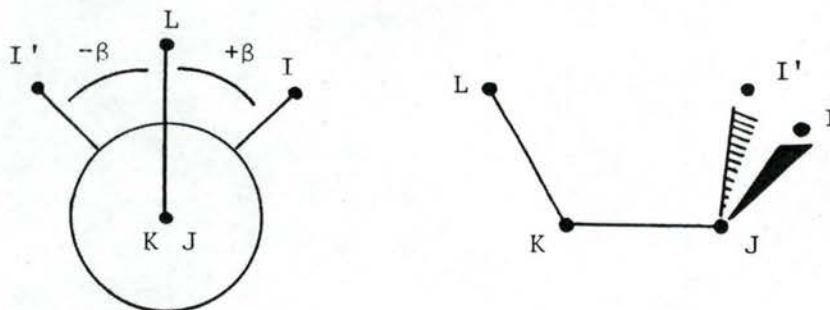
Ces formats sont conformes aux formats d'entrées du programme Gaussian 70. Ces formats sont toutefois restrictifs : ils limitent le nombre de chiffres significatifs derrière le point décimal. C'est pourquoi dans l'option

terminal nous avons adopté les formats suivants : I 3, I 4, F 11.8, I 4, F 13.8, I 4, F 13.8.

Et nous avons ajouté une option carte "CARDS DO" avec les formats : I 3, I 3, F 11.8, I 3, F 13.8, I 3, F 13.8.

Remarques :

1. Par rapport à l'atome I, les atomes J, K et L doivent avoir été préalablement définis.
2. On peut utiliser des points de référence (ou atomes bidons) pour faciliter l'édification du squelette moléculaire. Dans ce cas le numéro atomique doit être égal à zéro.
3. Les numéros de séquences sont attribués par l'interface au fur et à mesure que les atomes sont introduits.
4. Il est possible d'interrompre l'introduction des données pour la reprendre ultérieurement.
5. L'angle dièdre β entre les deux plans IJK et JKL doit être signé d'après la convention suivante :



IV. 4. Analyse Mathématique :

1. Construction d'un système d'axes de référence \vec{x} , \vec{y} , \vec{z} :

Celui-ci est déterminé par les trois premiers atomes :

- Le premier atome constitue l'origine du système d'axes. Ses coordonnées sont donc (0, 0, 0).
- Le deuxième atome, distant du premier d'une longueur BL, est situé sur l'axe \vec{z} . Ses coordonnées sont donc (0, 0, BL).

- Le troisième atome est dans le plan ZX et forme un angle α .
- a) ou bien il est lié au premier et ses coordonnées sont :
 $(BL \cdot \sin \alpha, 0, BL \cdot \cos \alpha)$

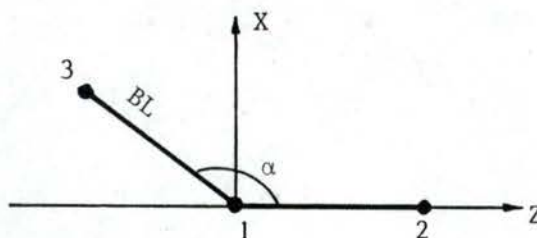


Fig. 2 : Cas où le 3e atome est lié au premier.

- b) ou bien il est lié au deuxième atome et il faut tenir compte d'une translation. Ses coordonnées seront alors :
 $(BL \cdot \sin \alpha, 0, \text{coordonnée [atome 2]} - BL \cdot \cos \alpha)$

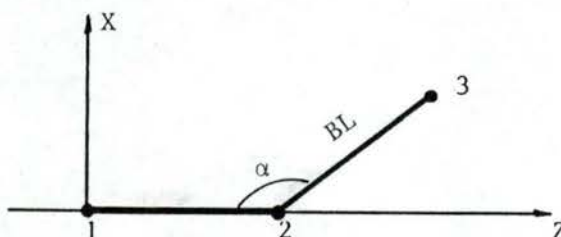


Fig. 3 : Cas où le 3e atome est lié au second.

- L'axe \vec{Y} est perpendiculaire au plan ZX et tel que le système d'axes soit droitier.

2. Calcul des coordonnées cartésiennes :

Ci-après, nous utilisons la notation suivante :

- I : pour désigner l'atome dont on cherche les coordonnées.
- J : l'atome auquel l'atome I est lié et distant d'une longueur BL.
- K : l'atome qui définit un angle α : \widehat{IJK} .
- L : l'atome qui détermine un angle dièdre β entre les plans IJK et JKL.

- a) Si l'atome I est lié à un atome J qui est situé sur l'axe \vec{Z} , il suffit de calculer les projections de la liaison sur les axes \vec{X} et \vec{Z} en tenant

compte de la translation. Les coordonnées sont :

$(BL \cdot \sin \alpha, 0, \text{coordonnée [atome J]} - BL \cdot \cos \alpha)$

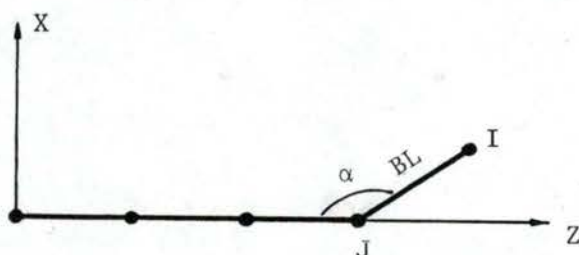


Fig. 4 : Cas où l'atome J est sur l'axe \vec{Z} .

L'exigence sur l'écartement de l'atome J par rapport à l'axe des \vec{Z} a été portée à 10^{-10} .

- b) Dans le cas contraire et pour les atomes suivants, considérons le cas général comme le suggère la figure :

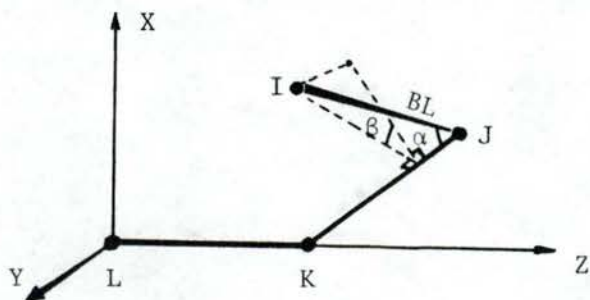


Fig. 5 : Exemple développé ultérieurement en guise d'illustration.

1° Construction d'un nouveau référentiel d'origine J et de base $(\vec{U}_2, \vec{U}_3, \vec{U}_4)$:

- Calcul des cosinus directeurs d'un vecteur unitaire \vec{U}_1 dont le sens et la direction sont donnés par les atomes L et K respectivement de coordonnées (x_1, y_1, z_1) et (x_2, y_2, z_2) .

$$l_1 = \cos \epsilon = \frac{x_2 - x_1}{d}$$

$$m_1 = \cos \delta = \frac{y_2 - y_1}{d}$$

$$n_1 = \cos \gamma = \frac{z_2 - z_1}{d}$$

où :
$$d = \sqrt{(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2 + (z_2 - z_1)^2}$$

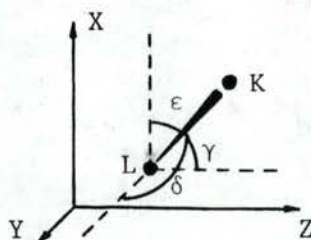


Fig. 6 : Cosinus directeurs d'une droite.

- Calcul des cosinus directeurs d'un deuxième vecteur \vec{U}_2 dont le sens et la direction sont donnés par les atomes K et J.
- Calcul du produit vectoriel :

$$\begin{aligned}\vec{VP} &= \vec{U}_1 \wedge \vec{U}_2 \\ &= (l_1\vec{X} + m_1\vec{Y} + n_1\vec{Z})(l_2\vec{X} + m_2\vec{Y} + n_2\vec{Z}) \\ &= (m_1n_2 - m_2n_1)\vec{X} + (n_1l_2 - n_2l_1)\vec{Y} + (l_1m_2 - l_2m_1)\vec{Z}\end{aligned}$$

Le vecteur \vec{VP} est perpendiculaire à \vec{U}_1 et \vec{U}_2 et tel que les vecteurs \vec{VP} , \vec{U}_1 et \vec{U}_2 forment un système droitier.

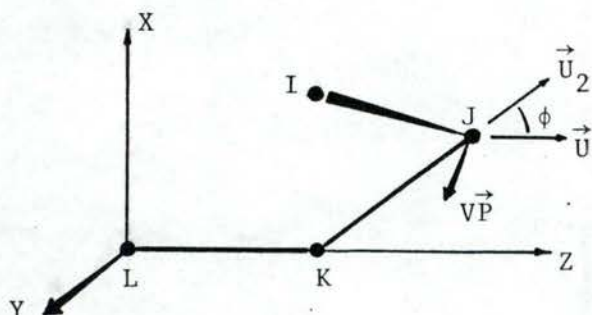


Fig. 7 : Illustration du produit vectoriel.

- Normalisation du vecteur \vec{VP} :

$$\vec{VP} = \|\vec{U}_1\| \cdot \|\vec{U}_2\| \cdot \sin \phi \cdot \vec{U}_3$$

où \vec{U}_3 est un vecteur unitaire ayant le même sens et la même direction que \vec{VP} .

$$\text{D'où : } \vec{U}_3 = \frac{\vec{VP}}{\sin \phi} \quad \text{et} \quad \sin \phi = \sqrt{1 - \cos^2 \phi}$$

Donnons les angles directeurs des nouveaux axes par le tableau :

	X'	Y'	Z'
X	$U_2(1)$	$U_4(1)$	$U_3(1)$
Y	$U_2(2)$	$U_4(2)$	$U_3(2)$
Z	$U_2(3)$	$U_4(3)$	$U_3(3)$

Les coordonnées des nouveaux points unités sont :

$$P.U._{X'} (\cos U_2(1), \cos U_2(2), \cos U_2(3))$$

$$P.U._{Y'} (\cos U_4(1), \cos U_4(2), \cos U_4(3))$$

$$P.U._{Z'} (\cos U_3(1), \cos U_3(2), \cos U_3(3))$$

Remarquons que les bases $(\vec{U}_2, \vec{U}_3, \vec{U}_4)$ et $(\vec{X}, \vec{Y}, \vec{Z})$ sont l'une et l'autre formées de vecteurs unitaires deux à deux orthogonaux.

Le changement de coordonnées (1) s'écrit alors :

$$\Delta X = X' \cdot \cos U_2(1) + Y' \cdot \cos U_4(1) + Z' \cdot \cos U_3(1)$$

$$\Delta Y = X' \cdot \cos U_2(2) + Y' \cdot \cos U_4(2) + Z' \cdot \cos U_3(2)$$

$$\Delta Z = X' \cdot \cos U_2(3) + Y' \cdot \cos U_4(3) + Z' \cdot \cos U_3(3)$$

3° Il suffit dès lors de faire la translation :

$$\begin{pmatrix} X_I \\ Y_I \\ Z_I \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} X_J \\ Y_J \\ Z_J \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \Delta X \\ \Delta Y \\ \Delta Z \end{pmatrix}$$

IV. 5. Programmation : voir listing

(Extrait du sous-programme PMAIN du programme GAUSSIAN 70).

IV. 6. Test de stabilité :

Le test considéré ici porte sur la fermeture des cycles.

Par exemple : partant d'un sommet d'un hexagone, revient-on exactement au même endroit après avoir parcouru le cycle ?

Le sommet observé se situe à l'origine.

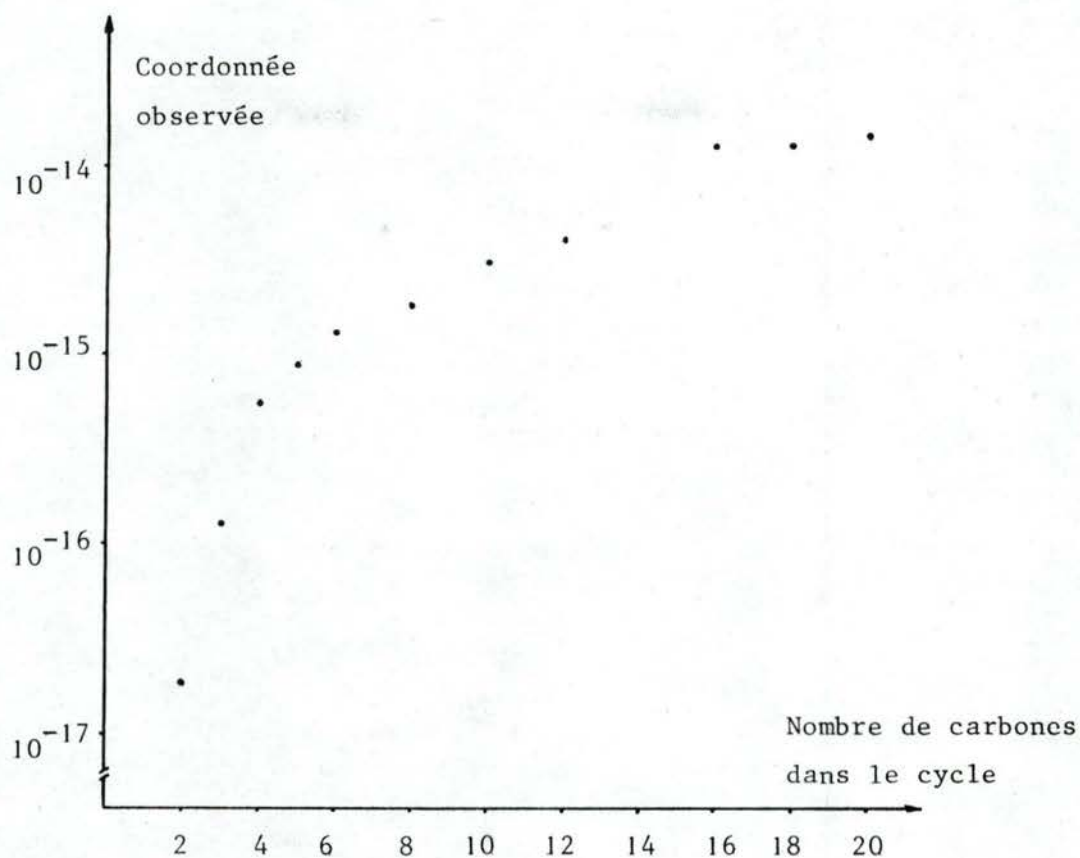


Fig. 9 : Evaluation de la précision de l'algorithme.

IV. 7. Exemples :

1. La molécule de benzène : C_6H_6

Graphique :

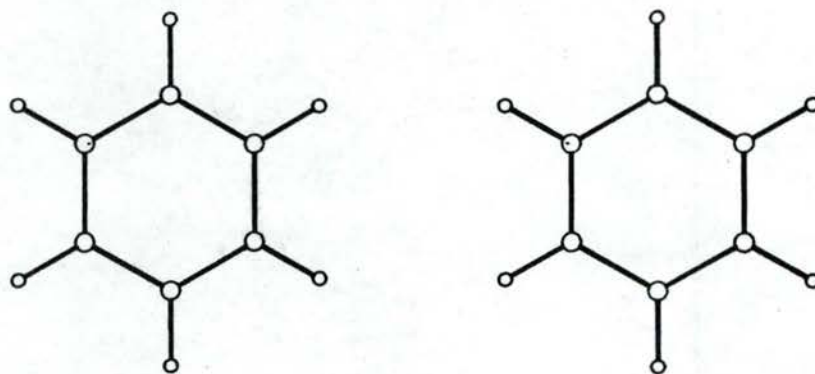


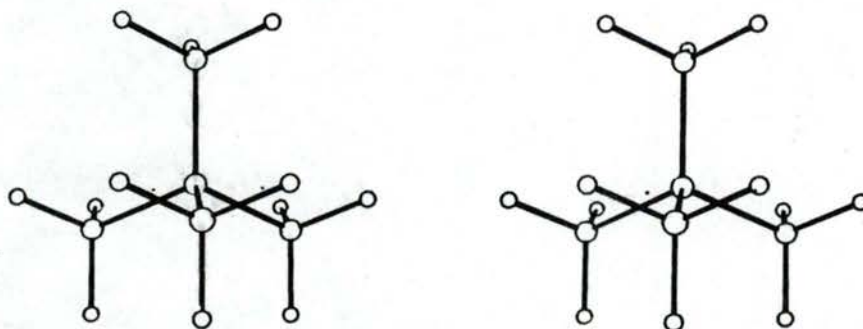
Fig. 10 : Vue stéréoscopique (° = hydrogène, ○ = carbone)

Z-matrice :

I	Z	J	BL	K	ALPHA	L	BETA
1	6	0	0.00000000	0	0.00000000	0	0.00000000
2	6	1	1.39700000	0	0.00000000	0	0.00000000
3	6	2	1.39700000	1	120.00000000	0	0.00000000
4	6	3	1.39700000	2	120.00000000	1	0.00000000
5	6	4	1.39700000	3	120.00000000	2	0.00000000
6	6	5	1.39700000	4	120.00000000	3	0.00000000
7	1	1	1.08400000	2	120.00000000	3	180.00000000
8	1	2	1.08400000	3	120.00000000	4	180.00000000
9	1	3	1.08400000	4	120.00000000	5	180.00000000
10	1	4	1.08400000	5	120.00000000	6	180.00000000
11	1	5	1.08400000	6	120.00000000	1	180.00000000
12	1	6	1.08400000	1	120.00000000	2	180.00000000

Coordonnées des 12 atomes :

I	Z	X	Y	Z
1	6	0.00000000	0.00000000	0.00000000
2	6	0.00000000	0.00000000	1.39700000
3	6	1.20983749	0.00000000	2.09550000
4	6	2.41967498	0.00000000	1.39700000
5	6	2.41967498	0.00000000	0.00000000
6	6	1.20983749	0.00000000	-0.69850000
7	1	-0.93877154	0.00000000	-0.54200000
8	1	-0.93877154	0.00000000	1.93900000
9	1	1.20983749	0.00000000	3.17950000
10	1	3.35844652	0.00000000	1.93900000
11	1	3.35844652	0.00000000	-0.54200000
12	1	1.20983749	0.00000000	-1.78250000

2. La molécule de néopentane : C_5H_{12} Graphique :Fig. 11 : Vue stéréoscopique (\circ = hydrogène, \bullet = carbone)

Z-matrice :

I	Z	J	BL	K	ALPHA	L	BETA
1	6	0	0.00000000	0	0.00000000	0	0.00000000
2	6	1	1.54000000	0	0.00000000	0	0.00000000
3	6	1	1.54000000	2	109.47000000	0	0.00000000
4	6	1	1.54000000	2	109.47000000	3	120.00000000
5	6	1	1.54000000	2	109.47000000	3	-120.00000000
6	1	2	1.09000000	1	109.47000000	3	180.00000000
7	1	2	1.09000000	1	109.47000000	3	60.00000000
8	1	2	1.09000000	1	109.47000000	3	-60.00000000
9	1	3	1.09000000	1	109.47000000	2	180.00000000
10	1	3	1.09000000	1	109.47000000	2	60.00000000
11	1	3	1.09000000	1	109.47000000	2	-60.00000000
12	1	4	1.09000000	1	109.47000000	2	180.00000000
13	1	4	1.09000000	1	109.47000000	2	60.00000000
14	1	4	1.09000000	1	109.47000000	2	-60.00000000
15	1	5	1.09000000	1	109.47000000	2	180.00000000
16	1	5	1.09000000	1	109.47000000	2	60.00000000
17	1	5	1.09000000	1	109.47000000	2	-60.00000000

Coordonnées des 17 atomes :

I	Z	X	Y	Z
1	6	0.00000000	0.00000000	0.00000000
2	6	0.00000000	0.00000000	1.54000000
3	6	1.45193686	0.00000000	-0.51330240
4	6	-0.72596843	-1.25741421	-0.51330240
5	6	-0.72596843	1.25741421	-0.51330240
6	1	-1.02766960	0.00000000	1.90331144
7	1	0.51383480	0.88998798	1.90331144
8	1	0.51383480	-0.88998798	1.90331144
9	1	1.45193686	-0.00000000	-1.60330240
10	1	1.96574070	-0.88998798	-0.14994718
11	1	1.96574070	0.88998798	-0.14994718
12	1	-0.72596843	-1.25741421	-1.60330240
13	1	-1.75362254	-1.25738739	-0.14994718
14	1	-0.21211815	-2.14737537	-0.14994718
15	1	-0.72596843	1.25641421	-1.60330240
16	1	-0.21211815	2.14737537	-0.14994718
17	1	-1.75362254	1.25738739	-0.14994718

3. La molécule de ferrocène : $\text{Fe}(\text{C}_5\text{H}_5)_2$

Graphique :

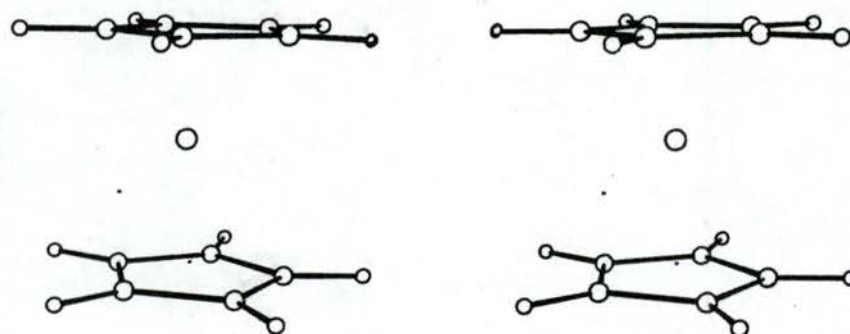


Fig. 12 : Vue stéréoscopique (• = hydrogène, o = carbone, 0 = fer)

Z-matrice :

I	Z	J	BL	K	ALPHA	L	BETA
1	6	0	0.00000000	0	0.00000000	0	0.00000000
2	6	1	1.43000000	0	0.00000000	0	0.00000000
3	6	2	1.43000000	1	108.00000000	0	0.00000000
4	6	3	1.43000000	2	108.00000000	1	0.00000000
5	6	4	1.43000000	3	108.00000000	2	0.00000000
6	1	1	1.09000000	2	126.00000000	3	180.00000000
7	1	2	1.09000000	3	126.00000000	4	180.00000000
8	1	3	1.09000000	4	126.00000000	5	180.00000000
9	1	4	1.09000000	5	126.00000000	1	180.00000000
10	1	5	1.09000000	1	126.00000000	2	180.00000000
11	0	1	1.21600000	2	54.00000000	3	0.00000000
12	26	1	2.03000000	11	53.20000000	2	90.00000000
13	6	12	2.03000000	11	143.20000000	1	180.00000000
14	0	13	1.21600000	12	53.20000000	11	180.00000000
15	6	13	1.43000000	14	54.00000000	11	90.00000000
16	6	15	1.43000000	13	108.00000000	14	0.00000000
17	6	16	1.43000000	15	108.00000000	13	0.00000000
18	6	17	1.43000000	16	108.00000000	15	0.00000000
19	1	13	1.09000000	15	126.00000000	16	180.00000000
20	1	15	1.09000000	16	126.00000000	17	180.00000000
21	1	16	1.09000000	17	126.00000000	18	180.00000000
22	1	17	1.09000000	18	126.00000000	13	180.00000000
23	1	18	1.09000000	13	126.00000000	15	180.00000000

Coordonnées des 21 atomes :

I	Z	X	Y	Z
1	6	0.00000000	0.00000000	0.00000000
2	6	0.00000000	0.00000000	1.43000000
3	6	1.36001082	0.00000000	1.87189430
4	6	2.20054373	0.00000000	0.71500000
5	6	1.36001082	0.00000000	-0.44189430
6	1	-0.88182852	0.00000000	-0.64068592
7	1	-0.88182852	0.00000000	2.07068592
8	1	1.69683934	0.00000000	2.90854590
9	1	3.29054373	0.00000000	0.71500000
10	1	1.69683934	0.00000000	-1.47854590
12	26	0.98357915	1.62548468	0.71475739
13	6	1.96757279	3.25095597	1.42952531
15	6	1.96757279	3.25096523	-0.00047469
16	6	0.60756197	3.25098021	-0.44236900
17	6	-0.23297094	3.25098021	0.71452531
18	6	0.60756197	3.25096523	1.87141961
19	1	2.84940131	3.25094396	2.07021123
20	1	2.84940131	3.25096152	-0.64116062
21	1	0.27073344	3.25098992	-1.47902060
22	1	-1.32297094	3.25098992	0.71452531
23	1	0.27073344	3.25096152	2.90807121

Coordonnées des 2 atomes bidons :

I	X	Y	Z
11	0.98376467	0.00000000	0.71474687
14	0.98380812	3.25096937	0.71477844

CHAPITRE V COORDONNEES CARTESIENNES DE POLYMERES HELICES PERIODIQUES.

V. 1. Introduction :

Certaines familles de polymères se caractérisent par la répétition d'un même ensemble d'atomes appelé unité monomérique.

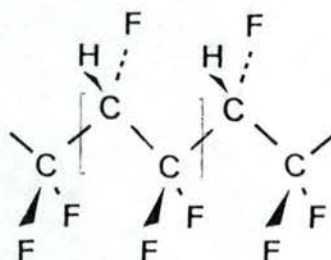


Fig. 13 : Le trifluoropolyéthylène.

Nous distinguons le "squelette" du polymère des atomes ou groupes d'atomes qui s'y fixent. A l'état cristallin, on observe des structures hélicées. Nous traitons ci-dessous le cas particulier des polymères diatomiques hélicés, c-à-d celui dont l'unité monomérique a un squelette constitué de deux atomes.

Il existe toutefois une méthode générale qui calcule les paramètres de l'hélice dans le cas où le squelette de l'unité monomérique contient plus de deux atomes. Ceci reste à implémenter.

V. 2. Cas des chaînes diatomiques hélicées.

Vu la symétrie qui caractérise de tels polymères, si on connaissait les coordonnées cartésiennes des atomes de l'unité monomérique, il suffirait de faire agir un certain nombre de fois un opérateur de translation et de rotation adéquat pour obtenir les coordonnées cartésiennes des atomes de tout le polymère ! Pour que cela soit vrai il faut que le squelette de l'unité monomérique ait une orientation particulière par rapport à un référentiel, de telle sorte qu'après avoir fait des rotations et des translations dans un sens et une direction donnés on retrouve le polymère souhaité.

Le problème est donc de retrouver l'angle de rotation " θ " et la distance de

déplacement "d" de l'unité monomérique ainsi que l'orientation particulière du squelette en fonction de ce que le chimiste connaît : des longueurs de liaisons l_{12} et l_{21} , des angles entre liaisons α_1 et α_2 , et des angles dièdres ou angles de torsion ϕ_{12} et ϕ_{21} .

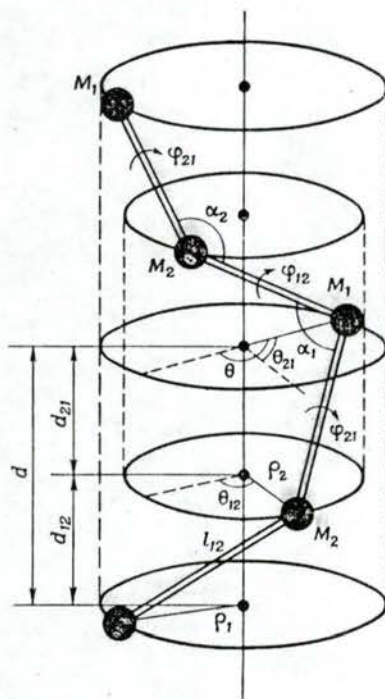


Fig. 14 : Paramètres hélicoïdaux et internes d'une chaîne diatomique.

Les expressions mathématiques qui expriment les paramètres de l'hélice en fonction des paramètres internes sont [9] :

$$\cos (\theta / 2)=\cos \left(\phi_{12} / 2+\phi_{21} / 2\right) \sin \left(\alpha_1 / 2\right) \sin \left(\alpha_2 / 2\right) \\ -\cos \left(\phi_{12} / 2-\phi_{21} / 2\right) \cos \left(\alpha_1 / 2\right) \cos \left(\alpha_2 / 2\right)$$

$$d_{12}=\left[\sin \left(\phi_{12} / 2+\phi_{21} / 2\right) \sin \left(\alpha_1 / 2\right) \sin \left(\alpha_2 / 2\right) \right. \\ \left.-\sin \left(\phi_{12} / 2-\phi_{21} / 2\right) \cos \left(\alpha_1 / 2\right) \cos \left(\alpha_2 / 2\right)\right] l_{12} / \sin (\theta / 2)$$

$$d_{21}=\left[\sin \left(\phi_{12} / 2+\phi_{21} / 2\right) \sin \left(\alpha_1 / 2\right) \sin \left(\alpha_2 / 2\right) \right. \\ \left.+\sin \left(\phi_{12} / 2-\phi_{21} / 2\right) \cos \left(\alpha_1 / 2\right) \cos \left(\alpha_2 / 2\right)\right] l_{21} / \sin (\theta / 2)$$

$$d=d_{12}+d_{21}$$

$$\rho_1 = [0.5 (l_{12}^2 - 2 l_{12} l_{21} \cos \alpha_2 + l_{21}^2 - d^2) / (1 - \cos \theta)]^{1/2}$$

$$\rho_2 = [0.5 (l_{12}^2 - 2 l_{12} l_{21} \cos \alpha_1 + l_{21}^2 - d^2) / (1 - \cos \theta)]^{1/2}$$

$$\cos \theta_{12} = (\rho_1^2 + \rho_2^2 + d_{12}^2 - l_{12}^2) / (2 \rho_1 \rho_2)$$

$$\cos \theta_{21} = (\rho_1^2 + \rho_2^2 + d_{21}^2 - l_{21}^2) / (2 \rho_1 \rho_2)$$

Dans le cas général du calcul des coordonnées cartésiennes, l'utilisateur doit introduire pour chaque atome les paramètres internes. L'ensemble de ces données est encore appelé la Z-matrice. C'est une structure logique composée des quatre vecteurs INMAT(50), BOND(50), ALPHA(50), BETA(50) et d'une matrice IZ(50,3). Dans le cas de l'hélice, l'orientation du squelette par rapport au référentiel est vitale. C'est pourquoi nous construisons une Z-matrice particulière :

- Les deux premiers atomes sont des atomes bidons qui fixent le système de référence. Ils sont transparents à l'utilisateur.
- Les deux atomes suivants sont les atomes du squelette. Nous détaillons ci-dessous comment nous calculons les paramètres internes par rapport aux deux atomes précédents alors que l'utilisateur introduit une longueur de liaison, un angle entre liaisons et un angle dièdre pour chaque atome; (l_{12} , α_1 , ϕ_{12} et l_{21} , α_2 , ϕ_{21}).
- Les deux atomes suivants sont deux atomes bidons qui occupent exactement la place des deux atomes du squelette de l'unité monomérique suivante. Le but est de faciliter la tâche de l'utilisateur lorsqu'il définit les atomes qui se greffent sur le squelette. Ils sont transparents à l'utilisateur.
- Les atomes suivants sont les atomes fixés sur le squelette de l'unité monomérique. Leurs paramètres internes sont introduits comme dans le cas de la Z-matrice habituelle.

Ces atomes bidons "transparents" à l'utilisateur sont néanmoins présents ! Lorsque la Z-matrice de l'unité monomérique est complète nous calculons les coordonnées cartésiennes des atomes comme dans le cas général. Ensuite nous appliquons le nombre d'opérateurs de rotation et translation souhaité.

Algorithme général : (sous-routine HELICE)

1. Déclarations et initialisations.
2. Choisir entre une chaîne lévogyre ou dextrogyre.
3. Lire les paramètres internes qui caractérisent les deux atomes du squelette : nombre atomique, longueur de liaison, angle entre liaisons et angle dièdre.
4. Lire les paramètres internes des atomes qui se greffent sur le squelette et les stocker dans la Z-matrice.
5. Calculer les paramètres hélicoïdaux du squelette en utilisant les expressions mathématiques ci-dessus : d_{12} , d_{21} , d , ρ_1 , ρ_2 , θ_{12} , θ_{21} , θ .
6. Compléter la Z-matrice avec :

- deux atomes bidons fixant le système de référence :

$$\text{INMAT}(1) = 0, \text{INMAT}(2) = 0, \text{IZ}(2,1) = 1, \text{BOND}(2) = 1.000.$$

- les nouveaux paramètres internes du premier atome du squelette :

$$\text{IZ}(3,1) = 1, \text{BOND}(3) = \rho_1, \text{IZ}(3,2) = 2, \text{ALPHA}(3) = 90.000.$$

- les nouveaux paramètres internes du second atome du squelette :

$$\text{IZ}(4,1) = 3, \text{BOND}(4) = l_{12}, \text{IZ}(4,2) = 1,$$

$$\text{ALPHA}(4) = \text{ARCOS} [(\rho_1 - \rho_2 \cdot \cos(\theta_{12})) / l_{12}] \cdot \frac{180.0}{\pi}$$

$$\text{où : } \cos \alpha = \frac{\Delta X}{l_{12}} = \frac{\rho_1 - \rho_2 \cdot \cos(\theta_{12})}{l_{12}}$$

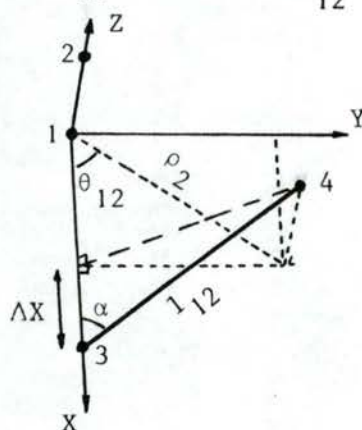
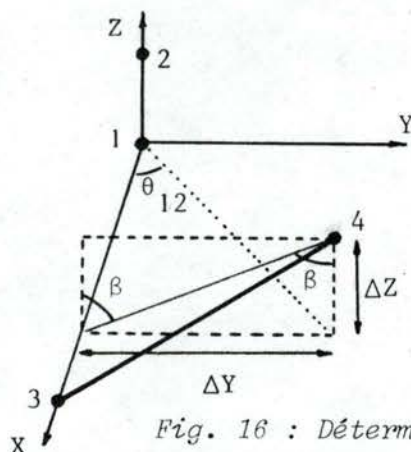


Fig. 15 : Détermination du paramètre interne α .

$$IZ(4,3) = 2$$

$$BETA(4) = ARCTG [\rho_2 \cdot \sin(\theta_{12}) / D12] \cdot \frac{180}{\pi}$$



$$\operatorname{tg} \beta = \frac{\Delta Y}{\Delta Z} = \frac{\rho_2 \cdot \sin \theta_{12}}{d_{12}}$$

Fig. 16 : Détermination du paramètre interne β .

Dans le cas d'une chaîne lévogyre il faut changer le signe de BETA(4).

7. Appeler la sous-routine KOORD qui calcule les coordonnées cartésiennes du monomère.
8. Demander et lire le nombre d'unités monomériques dont est constitué le polymère.

Tester que le polymère ne contiendra pas plus de cinquante atomes.

Calculer les coordonnées des unités monomériques suivantes de l'hélice :

Rotation d'angle θ autour de l'axe Z et

Déplacement d suivant l'axe Z

9. Visualisation de l'hélice à l'écran.

V. 3. Idéalisation de la molécule.

En pratique, les paramètres internes du squelette fournis par l'expérience ne sont pas toujours exacts. Par exemple, dans le cas du polypropylène nous avons trouvé dans la littérature des angles de torsion de 55° et 179° . Il en résultait que le paramètre d'hélice θ calculé était de 123° . Or ce polymère est caractérisé par une symétrie d'ordre trois, ce qui implique que le paramètre d'hélice θ doit être idéalement égal à 120° . Le problème qui se pose alors est le suivant : quels sont les paramètres internes exacts tel que le paramètre d'hélice θ qui est une fonction des paramètres internes, satisfait à une contrainte.

Dans le cas des polymères diatomiques il y a six paramètres internes : deux longueurs de liaisons, deux angles entre liaisons et deux angles de torsion. Mais nous pouvons raisonnablement faire l'hypothèse que les longueurs de liaisons expérimentales sont exactes.

Le problème s'énonce alors :

Quels sont les meilleurs $\alpha_1, \alpha_2, \phi_{12}, \phi_{21}$ tels que :

$$\Theta = f(\alpha_1, \alpha_2, \phi_{12}, \phi_{21}) = \text{Cste}$$

ou tels que :

$$[f(\alpha_1, \alpha_2, \phi_{12}, \phi_{21}) - \text{Cste}]^2 = 0$$

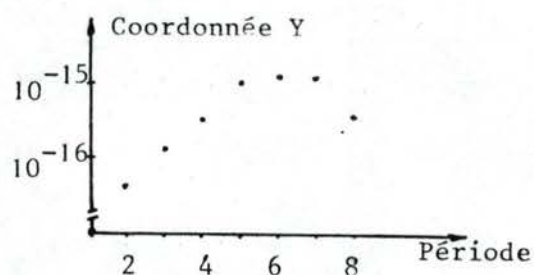
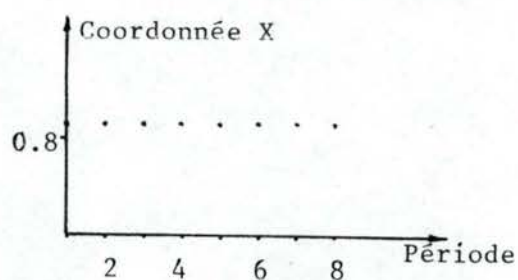
V. 4. Test de stabilité.

Le test considéré est le suivant :

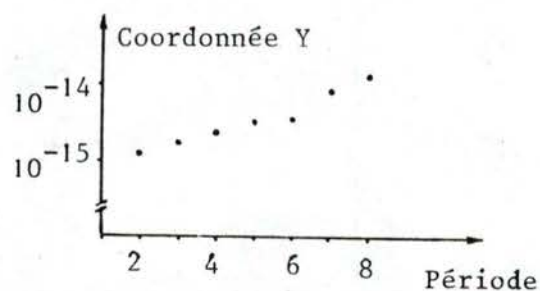
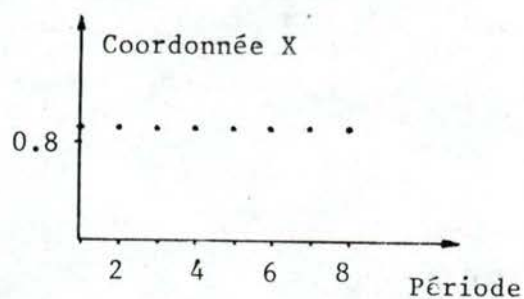
Nous prenons un atome de l'unité monomérique et observons quelle est sa position d'une période à l'autre. Dans le cas du propylène isotactique dextrogyre nous avons pour l'atome de coordonnées :

$$X = 0.812251002465850 \text{ D}+00$$

$$Y = 0.000000000000000 \text{ D}+00$$



Dans le cas lévogyre nous avons :



V. 5. Exemples :

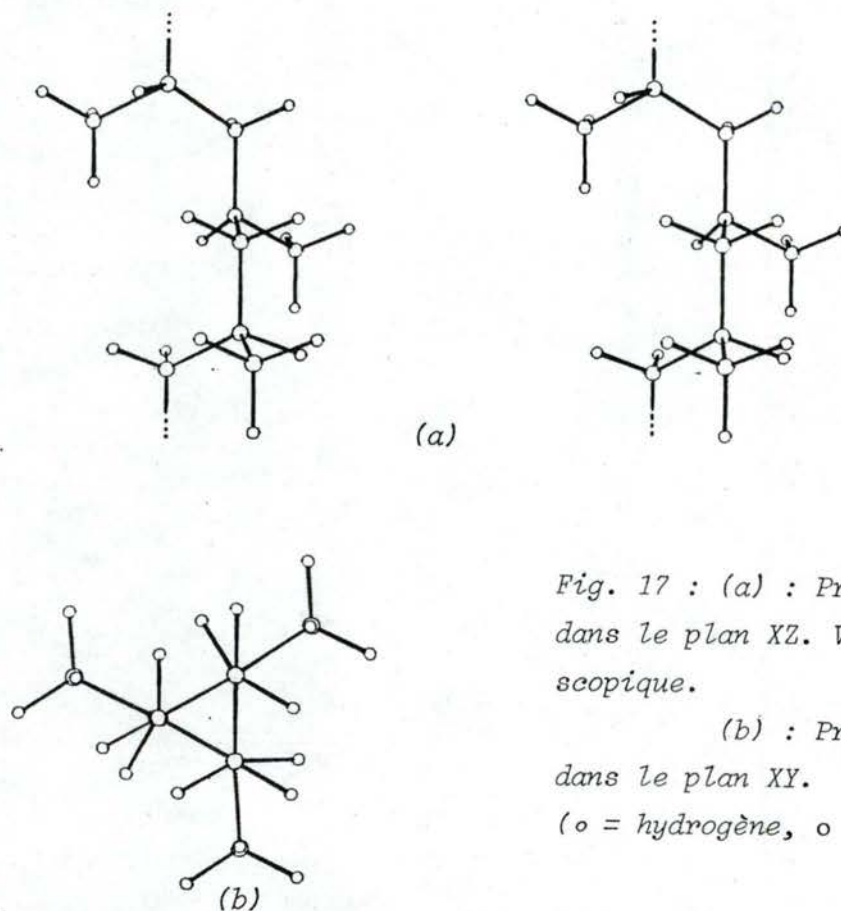
1. Le polypropylène isotactique (dextrogyre) : $-(CH_2-CHCH_3)_n-$ Graphique :

Fig. 17 : (a) : Projection dans le plan XZ. Vue stéréoscopique.

(b) : Projection dans le plan XY.

(o = hydrogène, o = carbone)

Données de l'unité monomérique :

(1)						
(2)						
3	6, 1.54, 114., 180.					
4	6, 1.54, 114., -60.					
(5)						
(6)						
7	6	4	1.54000000	3	110.00000000	5 124.08790000
8	1	4	1.09000000	5	109.47122000	6 87.95600000
9	1	7	1.09000000	4	109.47122000	5 180.00000000
10	1	7	1.09000000	4	109.47122000	5 60.00000000
11	1	7	1.09000000	4	109.47122000	5 -60.00000000
12	1	3	1.09000000	4	108.00000000	5 60.00000000
13	1	3	1.09000000	4	108.00000000	5 -60.00000000

Paramètres de l'hélice calculés :

$$\rho_1 = \rho_2 = 0.81225100 \text{ A}$$

$$D_{12} = 0.62637443 \text{ A}$$

$$\theta_{12} = 120.0^\circ$$

$$D_{21} = 1.5400 \text{ A}$$

$$\theta_{21} = 0.0^\circ$$

$$D = 2.16637443 \text{ A}$$

$$\theta = 120.0^\circ$$

$$\text{Période} = 6.499 \text{ A}$$

Coordonnées des 36 atomes (d'une spire):

I	Z	X	Y	Z
3	6	0.81225100	0.00000000	0.00000000
4	6	-0.40612550	0.70343000	0.62637443
7	6	-0.50928720	2.14687533	0.09966460
8	1	-1.43313349	0.66677642	0.26304111
9	1	-0.50857015	2.13684241	-0.99028899
10	1	0.34156277	2.72616577	0.45824085
11	1	-1.43387125	2.59927715	0.45824085
12	1	0.81242807	-1.03675383	0.33651368
13	1	1.71019470	0.51822357	0.33651368
14	6	-0.40612550	0.70343000	2.16637443
15	6	-0.40612550	-0.70343000	2.79274886
16	6	-1.60460498	-1.51449332	2.26603903
17	1	0.13912142	-1.57451822	2.42941554
18	1	-1.59627473	-1.50885588	1.17608545
19	1	-2.53171020	-1.06728085	2.62461528
20	1	-1.53410442	-2.54140750	2.62461528
21	1	0.49164112	1.22196027	2.50288811
22	1	-1.30389212	1.22196027	2.50288811
23	6	-0.40612550	-0.70343000	4.33274886
24	6	0.81225100	-0.00000000	4.95912329
25	6	2.11389218	-0.63238202	4.43241346
26	1	1.29401207	0.90774180	4.59578997
27	1	2.10484489	-0.62798653	3.34245988
28	1	2.19014742	-1.65888492	4.79098971
29	1	2.96797567	-0.05786964	4.79098971
30	1	-1.30406919	-0.18520643	4.66926254
31	1	-0.40630257	-1.74018384	4.66926254

Coordonnées des 4 atomes bidons :

I	X	Y	Z
1	0.00000000	0.00000000	0.00000000
2	0.00000000	0.00000000	1.00000000
5	-0.40612550	0.70343000	2.16637443
6	-0.40612550	-0.70343000	2.79274886

2. Le polybutène isotactique (dextrogyre) : $-(\text{CH}_2-\underset{\text{CH}_2-\text{CH}_3}{\underset{|}{\text{CH}}})_n-$

Graphique :

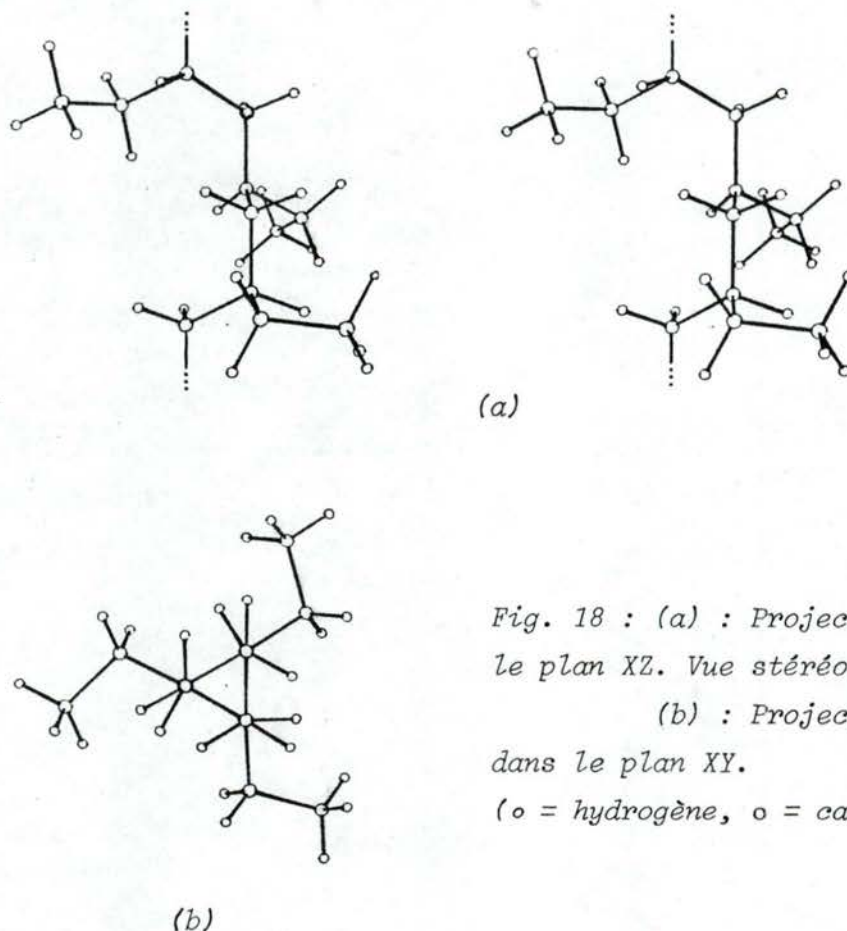


Fig. 18 : (a) : Projection dans le plan XZ. Vue stéréoscopique.

(b) : Projection dans le plan XY.

(o = hydrogène, o = carbone)

Données de l'unité monomérique :

(1)										
(2)										
3	6	1.54	114.	180.						
4	6	1.54	114.	-60.						
(5)										
(6)										
7	6	4	1.54000000	5	109.47122000	3	-123.04480000			
8	6	7	1.54000000	4	109.47122000	5	-90.00000000			
9	1	4	1.09000000	5	109.47122000	6	88.47760000			
10	1	7	1.09000000	4	109.47122000	8	120.00000000			
11	1	7	1.09000000	4	109.47122000	8	-120.00000000			
12	1	8	1.09000000	7	109.47122000	10	180.00000000			
13	1	8	1.09000000	7	109.47122000	10	60.00000000			
14	1	8	1.09000000	7	109.47122000	10	-60.00000000			
15	1	3	1.09000000	4	109.47122000	5	60.00000000			
16	1	3	1.09000000	4	109.47122000	5	-60.00000000			

Paramètres de l'hélice calculés :

$$\rho_1 = \rho_2 = 0.81225100 \text{ A}$$

$$\theta_{12} = 120.0 \text{ A}$$

$$\theta_{21} = 0.0 \text{ A}$$

$$\theta = 120.0 \text{ A}$$

$$D_{12} = 0.62637443 \text{ A}$$

$$D_{21} = 1.5400 \text{ A}$$

$$D = 2.16637443 \text{ A}$$

Coordonnées des 36 atomes :

I	Z	X	Y	z
3	6	0.81225100	0.00000000	0.00000000
4	6	-0.40612550	0.70343000	0.62637443
7	6	-0.48324713	2.15330626	0.11304111
8	6	-1.95883059	2.55947671	-0.05806999
9	1	-1.43342461	0.67612732	0.26304111
10	1	-0.00409457	2.81891129	0.83101241
11	1	0.02742072	2.22642804	-0.84715239
12	1	-2.43798312	1.89387167	-0.77604128
13	1	-2.01341668	3.58568783	-0.42140330
14	1	-2.46949842	2.48635489	0.90212352
15	1	0.83570682	-1.04120408	0.32162694
16	1	1.72568810	0.50028871	0.32162694
17	6	-0.40612550	0.70343000	2.16637443
18	6	-0.40612550	-0.70343000	2.79274886
19	6	-1.62319436	-1.49515742	2.27941554
20	6	-1.23715655	-2.97613541	2.10830444
21	1	0.13116887	-1.57944579	2.42941554
22	1	-2.43920150	-1.41300165	2.99738684
23	1	-1.94185360	-1.08946698	1.31922204
24	1	-0.42114941	-3.05829115	1.39033315
25	1	-2.09858841	-3.53651390	1.74497113
26	1	-0.91849729	-3.38182581	3.06849795
27	1	0.48385578	1.24434538	2.48800137
28	1	-1.29610678	1.24434538	2.48800137
29	6	-0.40612550	-0.70343000	4.33274886
30	6	0.81225100	-0.00000000	4.95912329
31	6	2.10644149	-0.65814884	4.44578997
32	6	3.19598714	0.41665870	4.27467887
33	1	1.30225574	0.90331847	4.59578997
34	1	2.44329607	-1.40590964	5.16376127
35	1	1.91443288	-1.13696106	3.48559647
36	1	2.85913254	1.16441948	3.55670758
37	1	4.11200509	-0.04917392	3.91134556
38	1	3.38799571	0.89547092	5.23487238
39	1	-1.31956259	-0.20314129	4.65437580
40	1	-0.42958132	-1.74463408	4.65437580

Coordonnées des 4 atomes bidons :

I	X	Y	Z
1	0.00000000	0.00000000	0.00000000
2	0.00000000	0.00000000	1.00000000
5	-0.40612550	0.70343000	2.16637443
6	-0.40612550	-0.70343000	2.79274886

CHAPITRE VI MODULES DE CONTROLES.

VI. 1. Introduction :

L'utilisateur, ayant la molécule sous les yeux, doit pouvoir vérifier les distances entre les atomes, les angles entre les liaisons, l'angle dièdre entre deux plans, les coordonnées ou encore la distance d'un point à un plan.

C'est ce qu'offre l'option "DATA SCREEN". Celle-ci appelle un module qui présente le "menu" suivant :

```
COORDINATES
DISTANCE
BOND ANGLE
DIHEDRAL ANGLE
IN PLANE
RETURN
```

Ce module détecte également le choix de l'utilisateur et appelle le module correspondant.

Physiquement tous ces modules sont rassemblés dans la même sous-routine GEVEN.

VI. 2. Option "COORDINATE".

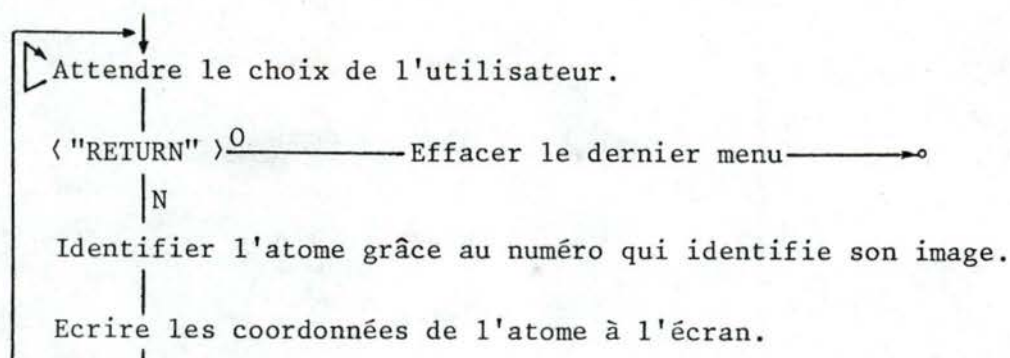
Fonction : Faire apparaître dans le coin supérieur droit de l'écran les coordonnées d'un atome. Le choix de l'atome se fait par simple contact entre le bic magnétique et l'écran à l'endroit où l'atome est dessiné.

Algorithme général :

```

      |
Eteindre le menu précédent.
      |
Ecrire à l'écran : "Please touch the atom for which you
                  want to know the coordinates".
                  "X = "
                  "Y = "
                  "Z = "
      |
                  "RETURN".
      ↓

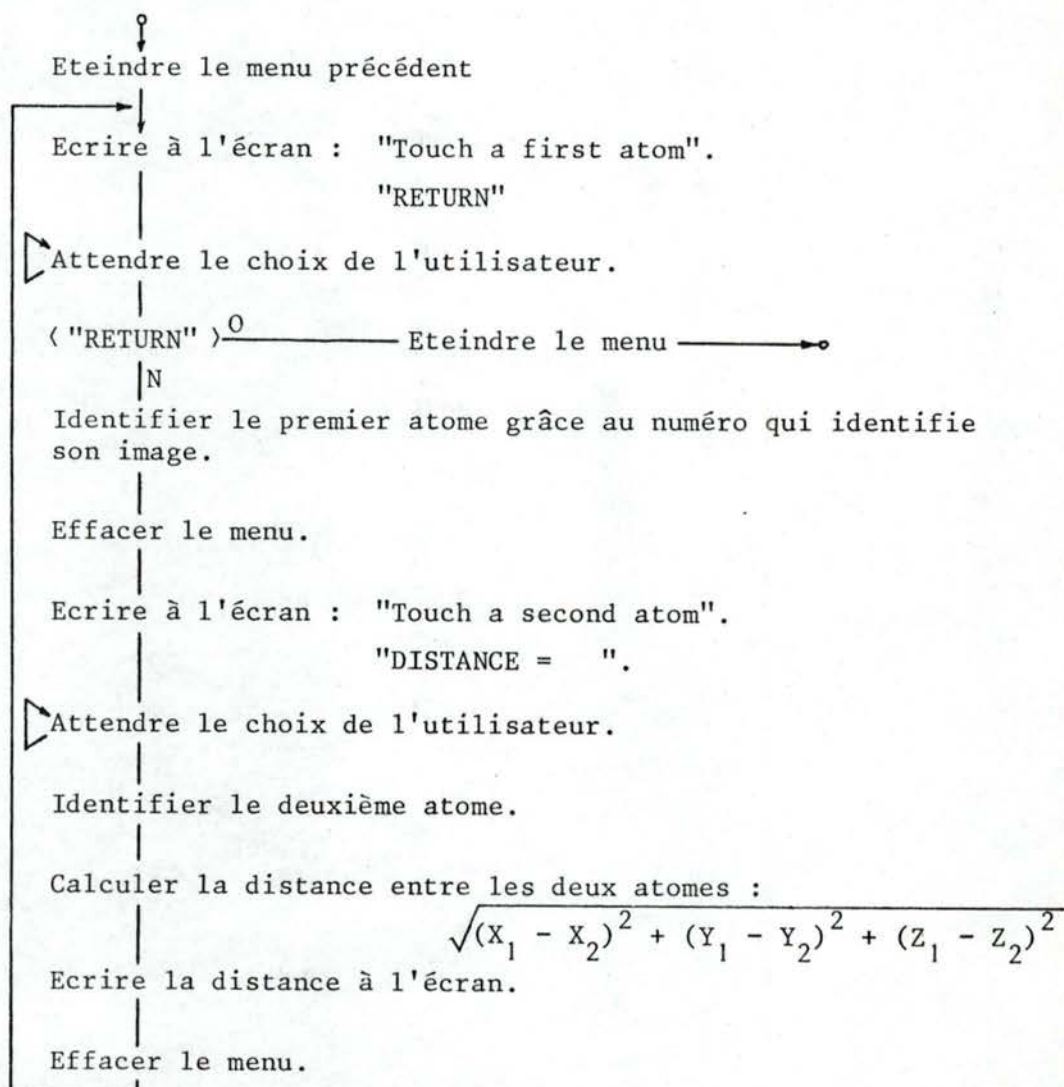
```



VI. 3. Option "DISTANCE".

Fonction : Calculer et écrire à l'écran la distance entre deux atomes choisis. Comme ci-dessus le choix se fait directement à l'écran avec le bic magnétique.

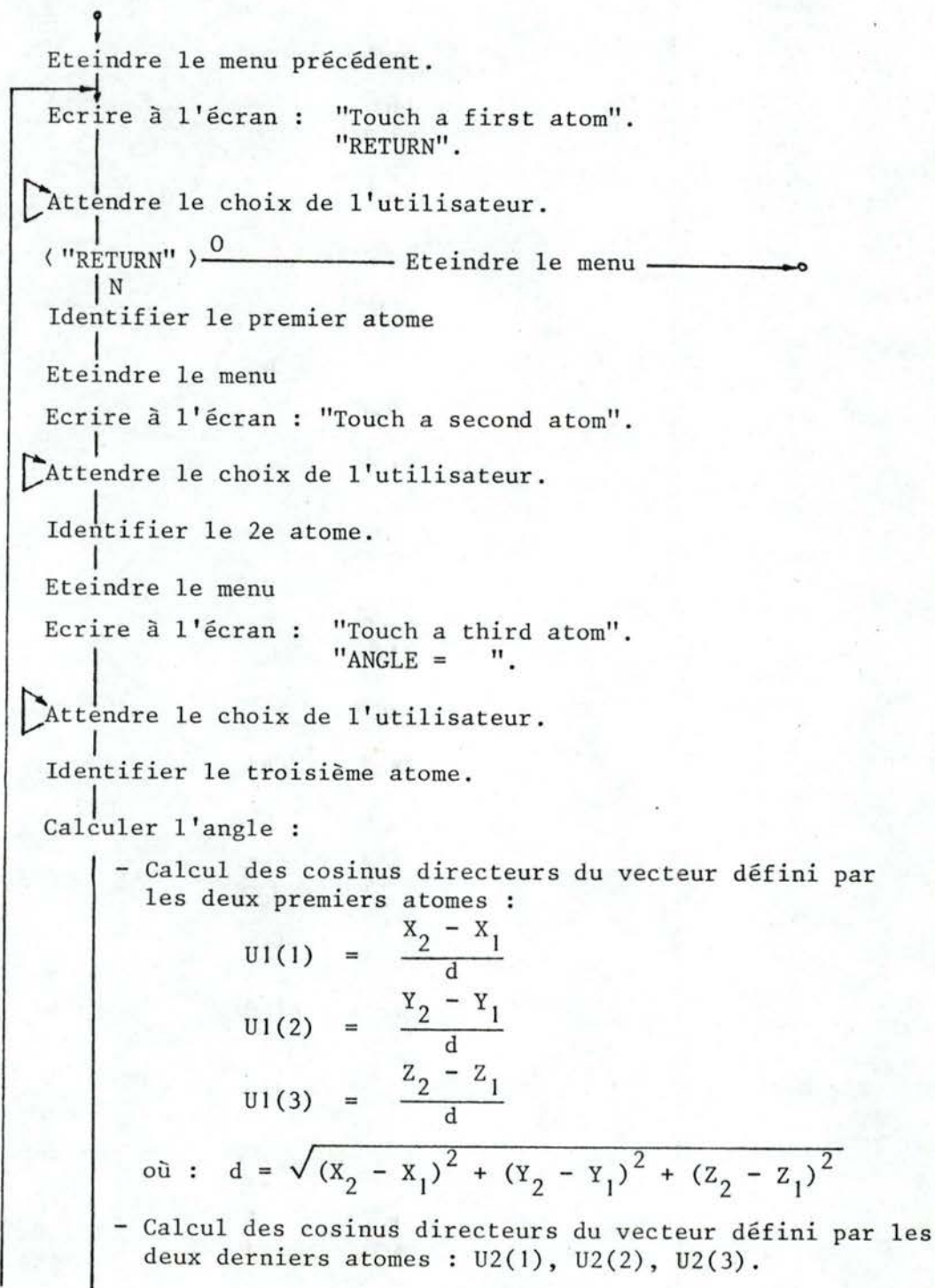
Algorithme général :

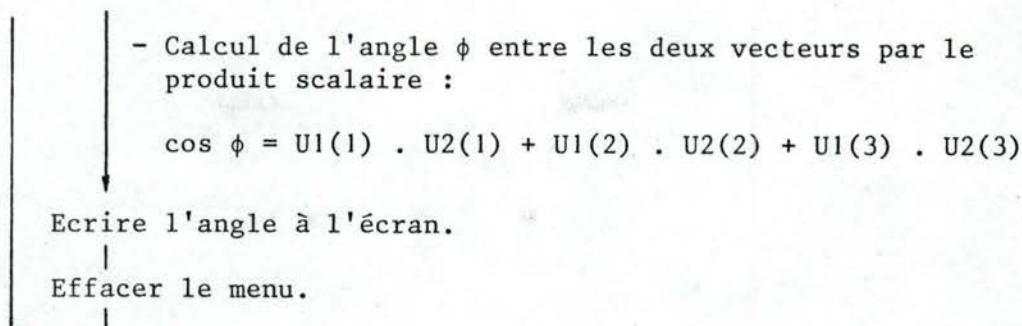


VI. 4. Option "BOND ANGLE".

Fonction : Calculer l'angle entre deux liaisons adjacentes c-à-d l'angle défini par trois atomes.

Algorithme général :

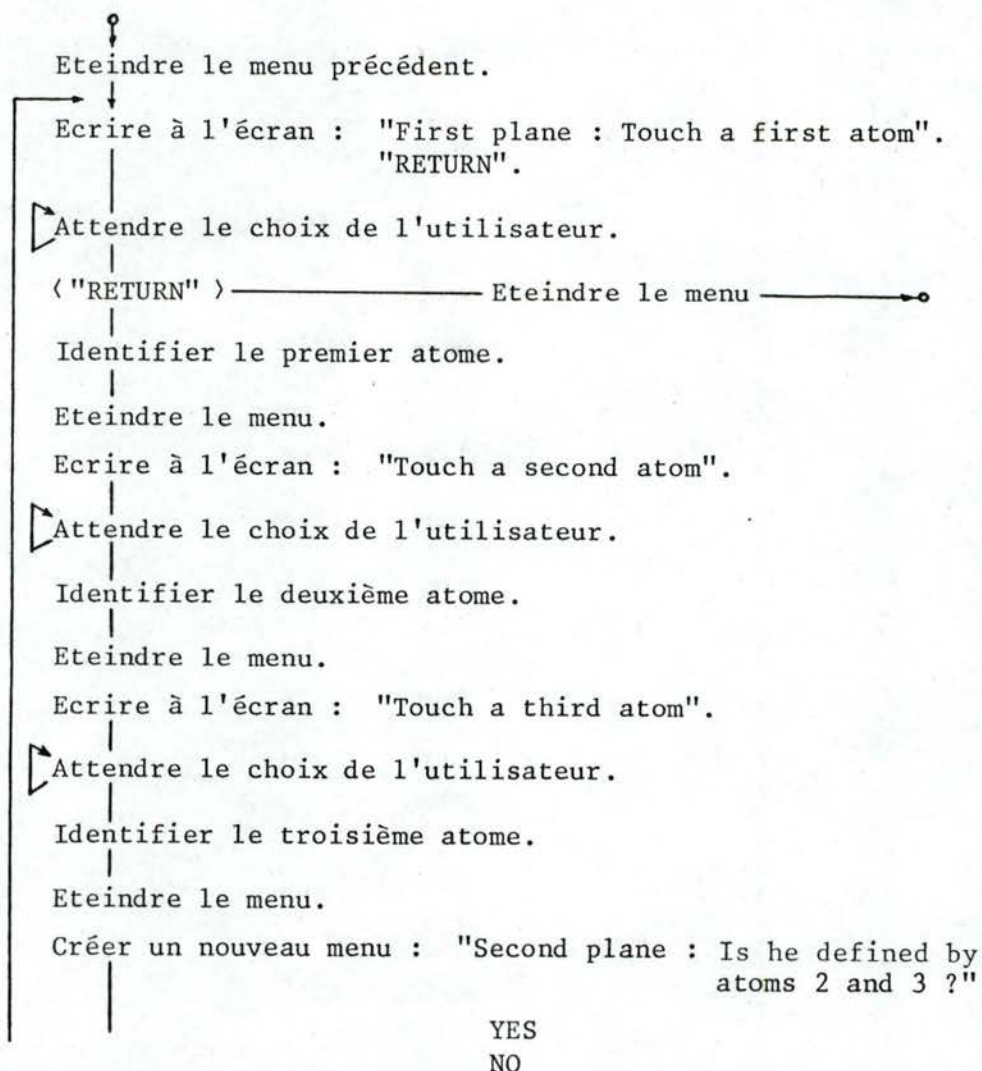


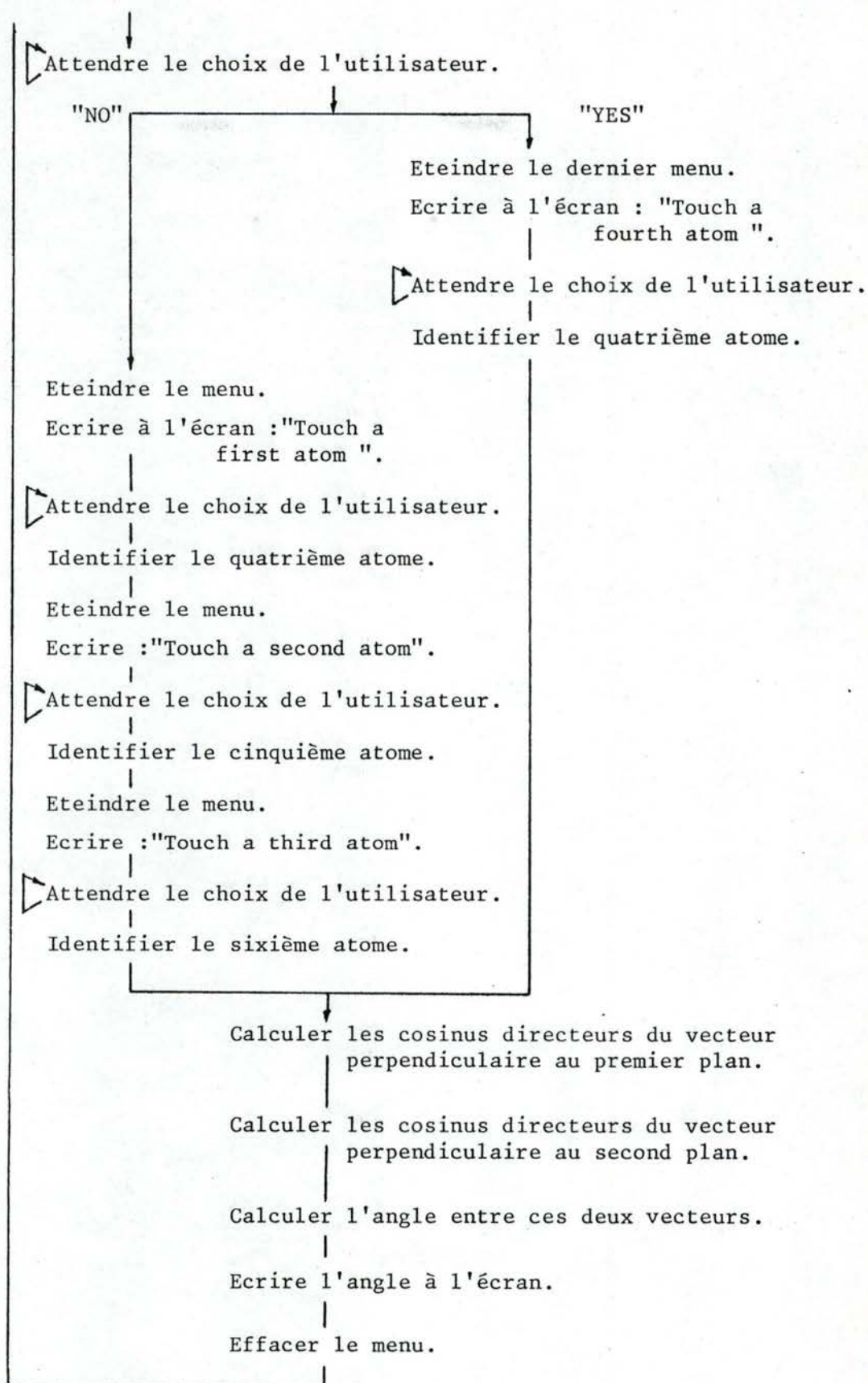


VI. 5. Option "DIHEDRAL ANGLE".

Fonction : Calculer et écrire à l'écran l'angle dièdre défini par deux plans. Ces deux plans sont ou bien définis séparément par trois atomes ou bien ils ont deux atomes en commun.

Algorithme général :





VI. 6. Option "IN PLANE". -----

Fonction : Calculer et écrire à l'écran la distance d'un atome à un plan déterminé par trois atomes.

Algorithme : Cette option prévue dans le menu n'a pas encore été réalisée. Une solution est :

Soient le point $P(x_p, y_p, z_p)$ et le plan π d'équation normale :

$$x.\cos \alpha + y.\cos \beta + z.\cos \gamma - p = 0$$

où : $\cos \alpha$, $\cos \beta$, et $\cos \gamma$ sont les cosinus directeurs d'une droite perpendiculaire au plan, et p la distance entre le plan et le centre du système de référence.

p est obtenu en remplaçant dans l'équation du plan x , y et z par les coordonnées d'un des trois atomes définissant le plan,

soit : $H(x_h, y_h, z_h)$.

$$p = x_h.\cos \alpha + y_h.\cos \beta + z_h.\cos \gamma$$

Dès lors la distance du point P au plan π vaut :

$$|x_p.\cos \alpha + y_p.\cos \beta + z_p.\cos \gamma - p|$$

CHAPITRE VII MODULES DE DESSIN.

VII. 1. Introduction : -----

Dans le menu principal certaines options sont uniquement des aides à la visualisation de la molécule à l'écran :

- Draw molecule
- Scale
- Screen molecule
- Screen atoms
- Erase atom
- Translation
- Modification.

Certaines options prévues n'ont pas encore été réalisées.

C'est le cas de :

"Draw molecule" : Le but est d'offrir à l'utilisateur une sortie sur table traçante (BENSON). Ainsi, satisfait de la géométrie d'une molécule, il pourrait en garder une trace s'il le souhaite.

"Erase atom" : Si l'utilisateur n'est pas satisfait de la position d'un des atomes de la molécule, cela lui permettrait "d'effacer" l'atome. Deux solutions se présentent. La première est de transformer l'atome en atome bidon. Dans ce cas il faut identifier l'atome et mettre la valeur nulle dans la variable INMAT (numéro de l'atome).

La deuxième solution tient compte du principe de calcul des coordonnées. Si les coordonnées d'un atome sont erronées, les coordonnées des atomes suivants qui se basent sur celles-ci seront également erronées. D'où tous les atomes définis après l'atome erroné pourraient être considérés comme erronés. Dans ce cas, il faudrait identifier l'atome et mettre à jour le nombre d'atomes corrects : $NAT = \text{numéro de l'atome} - 1$.

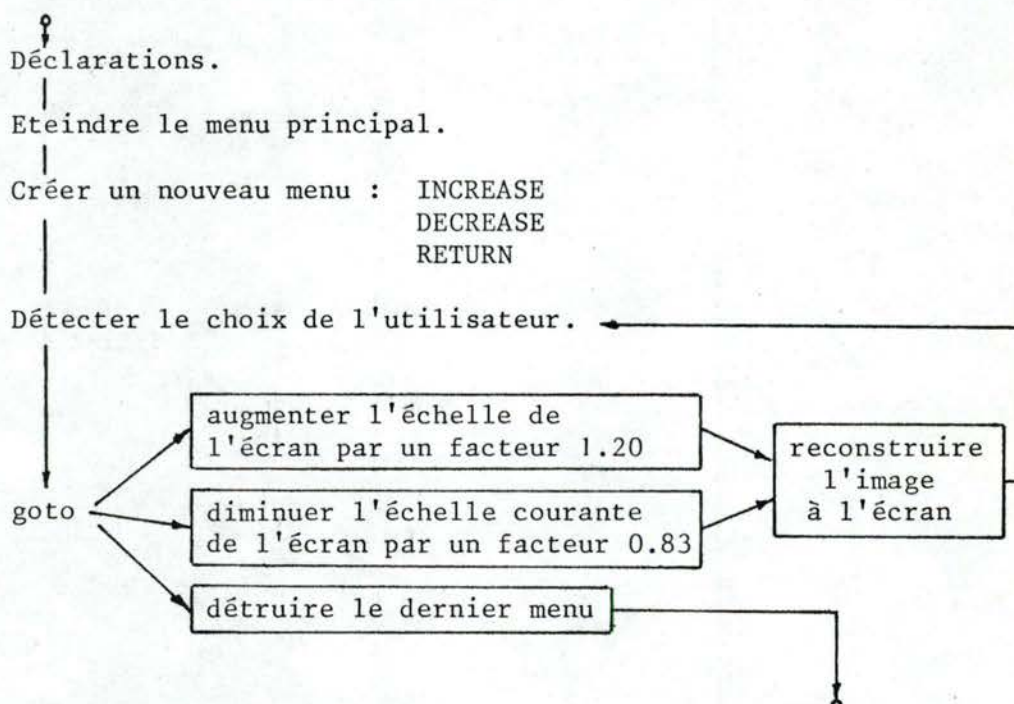
"Modification" : Pourrait être une autre solution au problème précédent.

L'objectif est de permettre à l'utilisateur de modifier sélectivement les longueurs de liaisons, les angles et les angles dièdres. Ceci implique qu'il faille recalculer les coordonnées.

VII. 2. Option "SCALE".

VII.2.1. Fonction : permettre à l'utilisateur d'agrandir ou de diminuer la taille de la molécule à l'écran.

VII.2.2. Algorithme général : (sous-routine SCHAAL)



Remarque :

L'échelle de l'écran est contrôlée par l'instruction :

CALL SCAL (SCAL X0, SCAL Y0, SCAL X1, SCAL Y1), où SCAL X0 et SCAL X1 sont respectivement les bornes inférieure et supérieure de l'axe horizontal. Il en est de même avec SCAL Y0 et SCAL Y1 pour l'axe vertical.

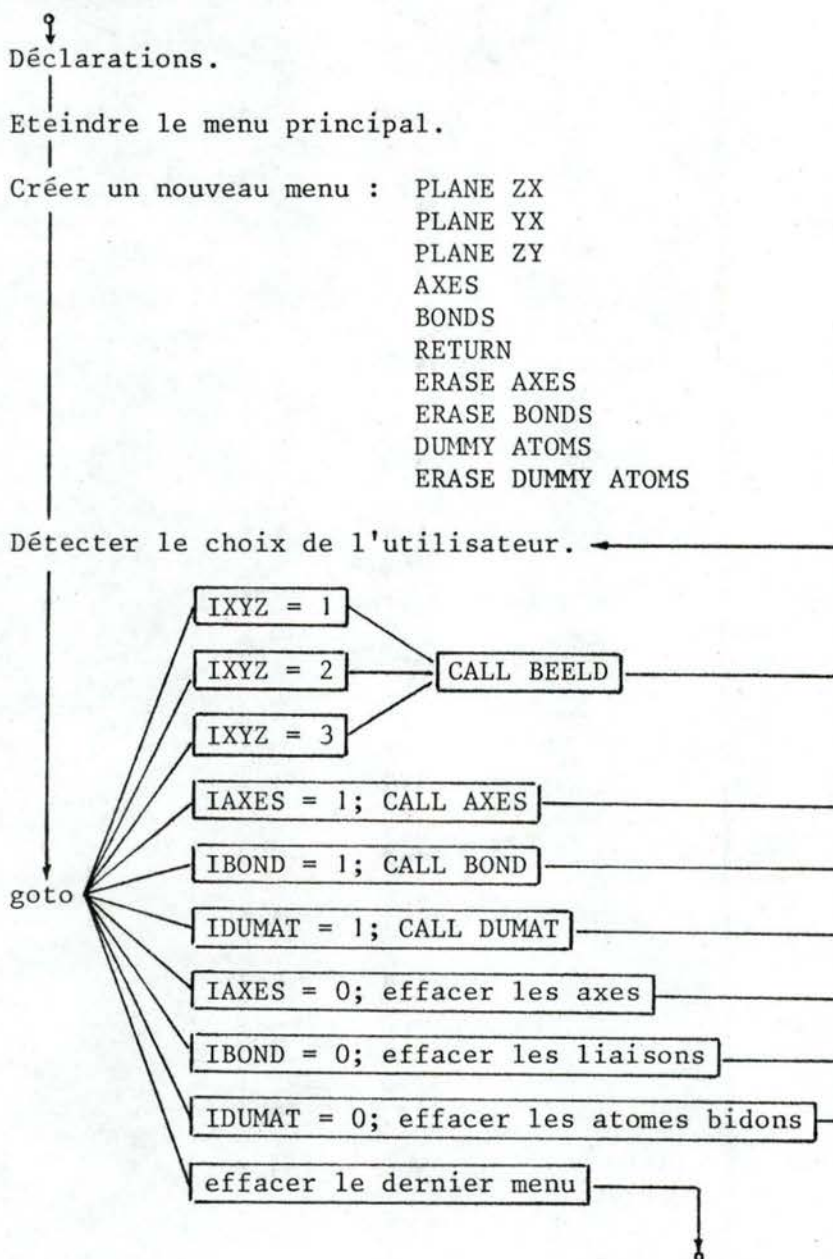
VII. 3. Option "SCREEN MOLECULE".

VII.3.1. Fonction : Présenter différents modes de visualisation de la molécule.

L'utilisateur peut demander une des projections suivantes : projection de la molécule dans le plan ZX, dans le plan YX ou dans le plan ZY. Il peut demander les axes de référence et les effacer. Il peut visualiser les liaisons entre les atomes ou pas, pour autant qu'il ait indiqué les liaisons entre les atomes

au moment où il a introduit ses données.

VII.3.2. Algorithme général : (sous-routine SCREEN)



IXYZ : paramètre indiquant le plan dans lequel la molécule est projetée :

IXYZ = 1 projection dans le plan ZX
IXYZ = 2 projection dans le plan XY
IXYZ = 3 projection dans le plan ZY

IAXES : paramètre indiquant si le système d'axes est demandé à l'écran
(IAXES = 1) ou pas (IAXES = 0).

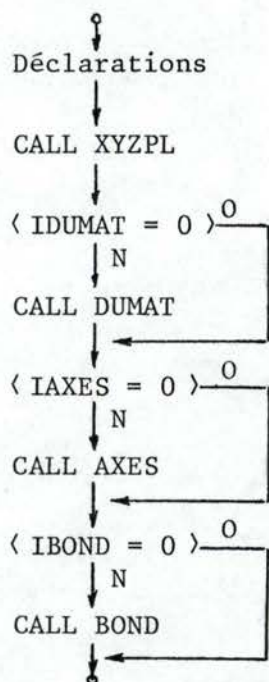
IBOND : idem pour les liaisons.

IDUMAT : idem pour les atomes bidons.

VII.3.3. Sous-routine BEELD :

Fonction : L'objectif est, lorsque l'utilisateur demande la projection de la molécule dans un plan ou fait une translation ou une rotation de la molécule dans son système d'axes de référence ou encore change d'échelle, de reconstruire l'image de la molécule avec les axes, les atomes bidons, et les liaisons s'ils avaient été demandés, sans que l'utilisateur ait à le redemander !

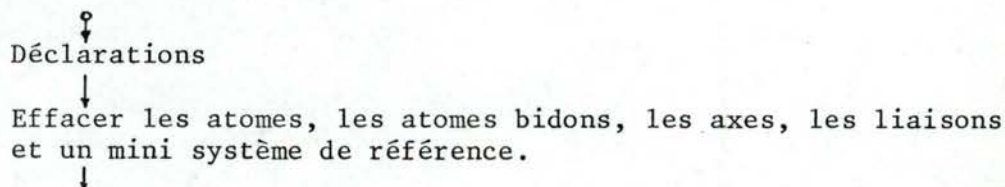
Algorithme général :



VII.3.4. Sous-routine XYZPL :

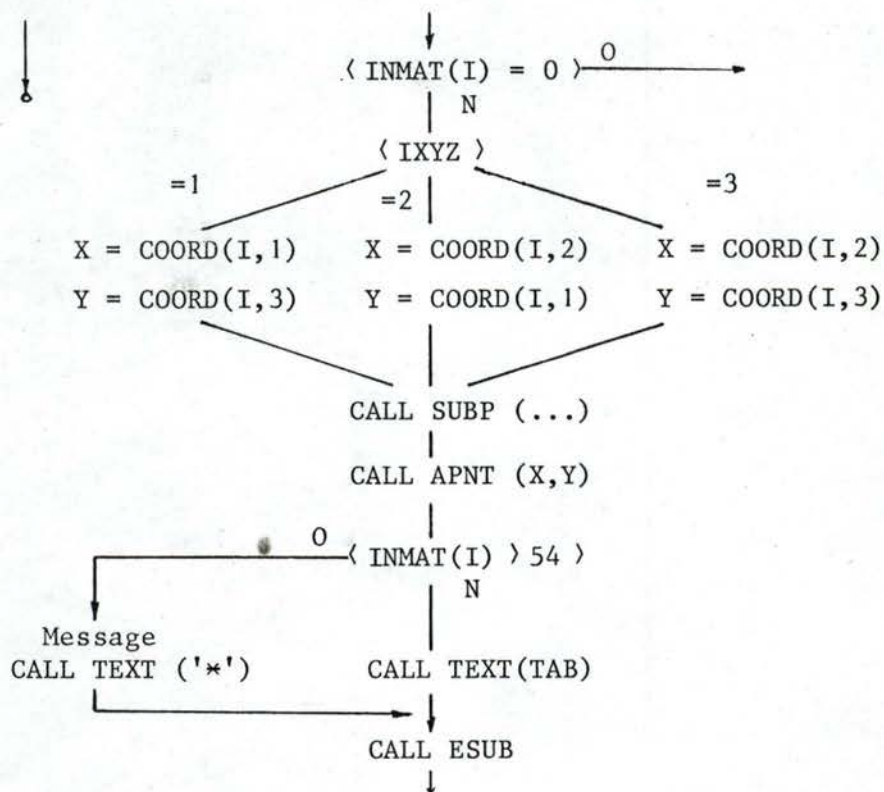
Fonction : Visualiser à l'écran la projection de tous les atomes de la molécule dans un plan choisi (excepté les atomes bidons). Attribuer à chaque image d'un atome un numéro identifiant.

Algorithme général :



Reconstruire le mini système de référence.

Pour chaque atome faire :



Remarques :

- L'algorithme de la sous-routine XYZPL présenté ici est incomplet. Nous le complèterons lorsque nous aborderons l'option "SCREEN ATOMS".
- Les instructions : CALL SUBP(.); ...; CALL ESUB permettent d'attribuer à l'image incluse entre ces instructions, un numéro identifiant.
- Ici l'image est celle d'un atome représenté par un point et son symbole chimique.
- Les images des atomes sont identifiées par les numéros 200 à 249.

VII.3.5. Sous-routine AXES :

Fonction : Dessiner le système d'axes de référence correspondant au plan de projection de la molécule. Cette image a comme identifiant le numéro 35.

VII.3.6. Sous-routine DUMAT :

Fonction : Même fonction que pour la sous-routine XYZPL mais pour tous les atomes bidons de la molécule.

Algorithme général :

Semblable à la sous-routine XYZPL. Les différences sont :

- Le test sur la variable INMAT(I) est inversé.
- L'image d'un atome bidon est constituée d'un point et de la lettre "D" scintillante.
- Non seulement chaque image est identifiée par un numéro, mais en plus l'ensemble des images des atomes bidons est identifié par le numéro 31. Dès lors, pour effacer tous les atomes bidons de l'écran il suffit de faire : CALL ERAS (31).

VII.3.7. Sous-routine BOND :

Fonction : dessiner à l'écran les liaisons de la molécule.

Description topologique :

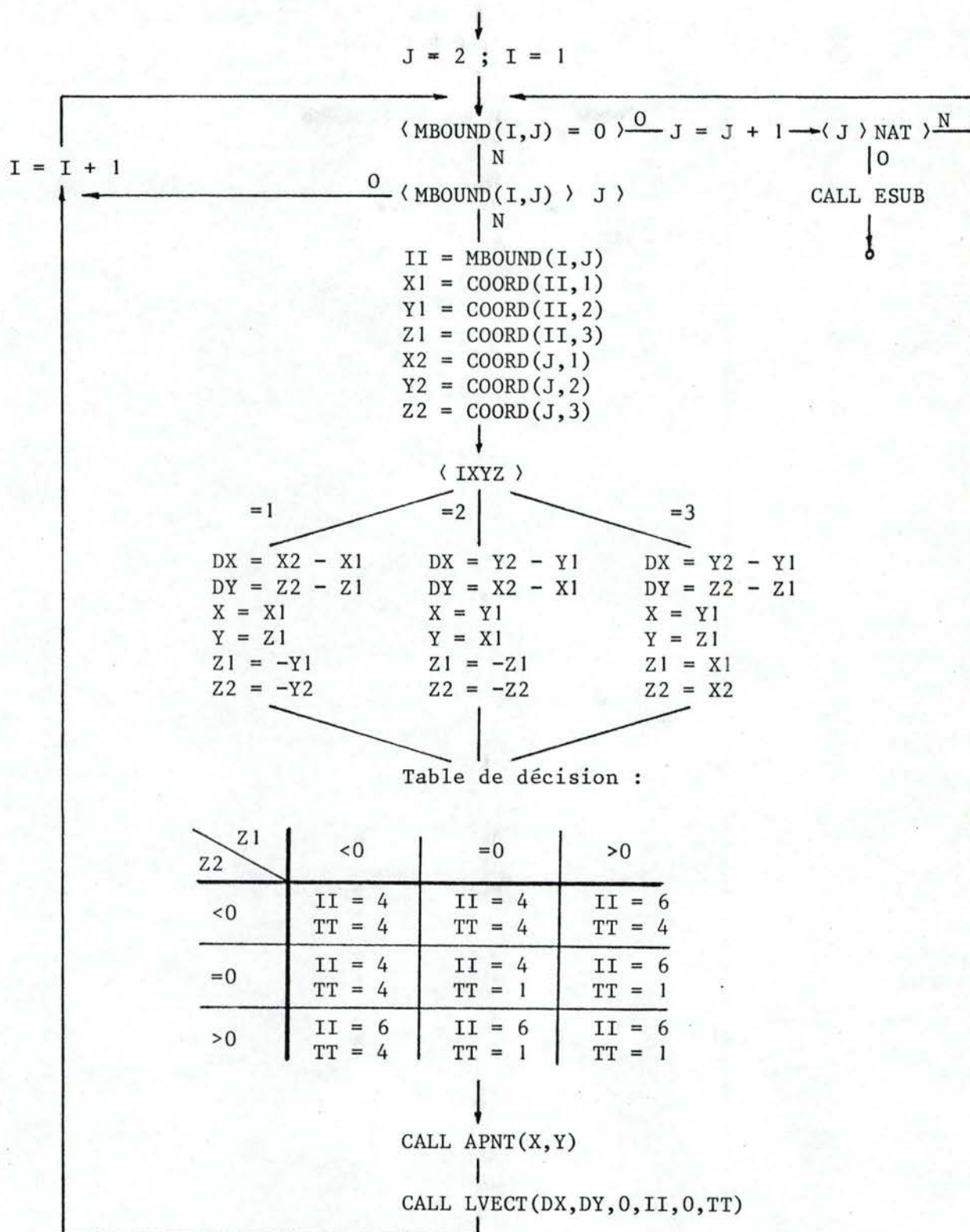
Une molécule peut être représentée par un graphe où les sommets sont les atomes et les arêtes les liaisons chimiques. A ce graphe on peut associer une matrice où chaque élément de matrice indique le nombre de liaisons entre deux atomes. Comme dans notre cas la molécule peut contenir jusqu'à cinquante atomes, la matrice contiendrait 2500 éléments. Mais la matrice étant symétrique on peut se contenter de 1225 éléments. Ce qui est encore beaucoup. Remarquons qu'avec cette représentation un sommet du graphe peut être relié aux quarante-neuf autres sommets. Or chimiquement un atome ne peut avoir quarante-neuf liaisons avec des atomes voisins ! C'est pourquoi la solution adoptée est celle d'une matrice (50 × 8) où l'élément (I,J) indique l'atome avec lequel l'atome I fait une liaison. Nous permettons donc qu'un atome ait huit liaisons au plus. La matrice est appelée MBOUND(I,J) et ne contient plus que 400 éléments. La restriction sur le nombre de liaisons par atome est acceptable : les molécules traitées par ordinateur qui ont des atomes liés à plus de huit voisins sont très peu fréquentes à l'heure actuelle.

Algorithme général :

```

      ↓
Déclarations
      |
CALL SUBP(34)
      |

```

La variable II règle l'intensité du vecteur dessiné à l'écran.

La variable TT règle la forme du vecteur : TT = 1 : trait continu

TT = 2 : -.-.-.-.-.-.-.-.-.-

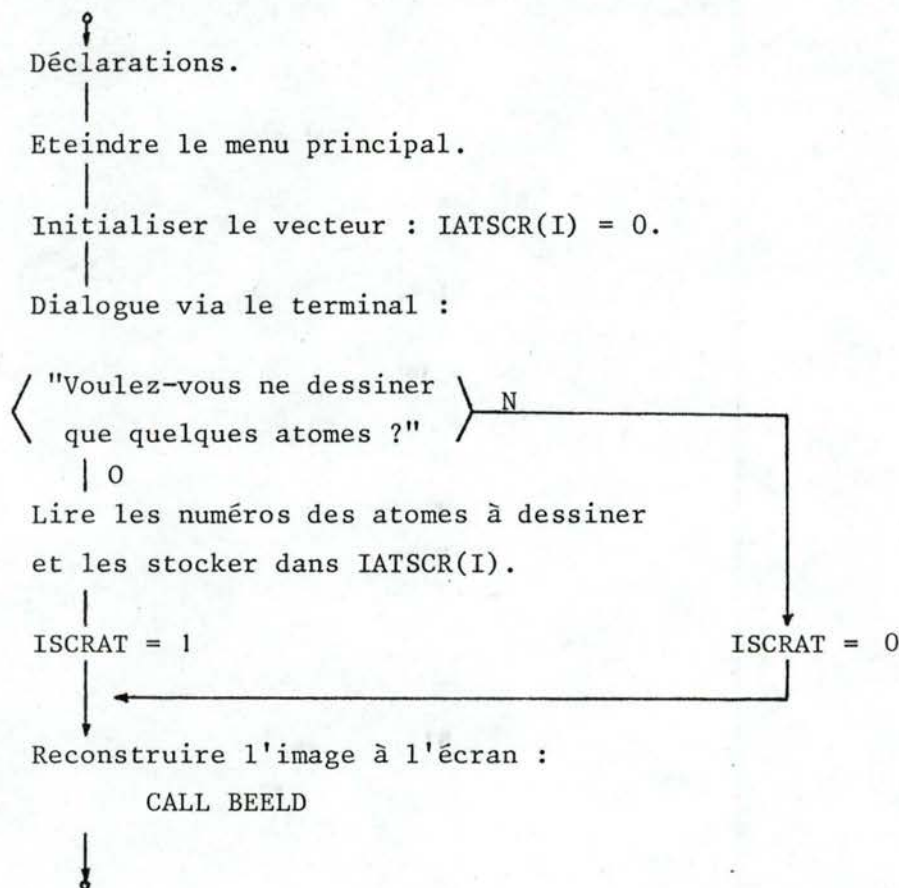
TT = 3 : - - - - -

TT = 4 :-.-.-.-.-

VII. 4. Option "SCREEN ATOMS".

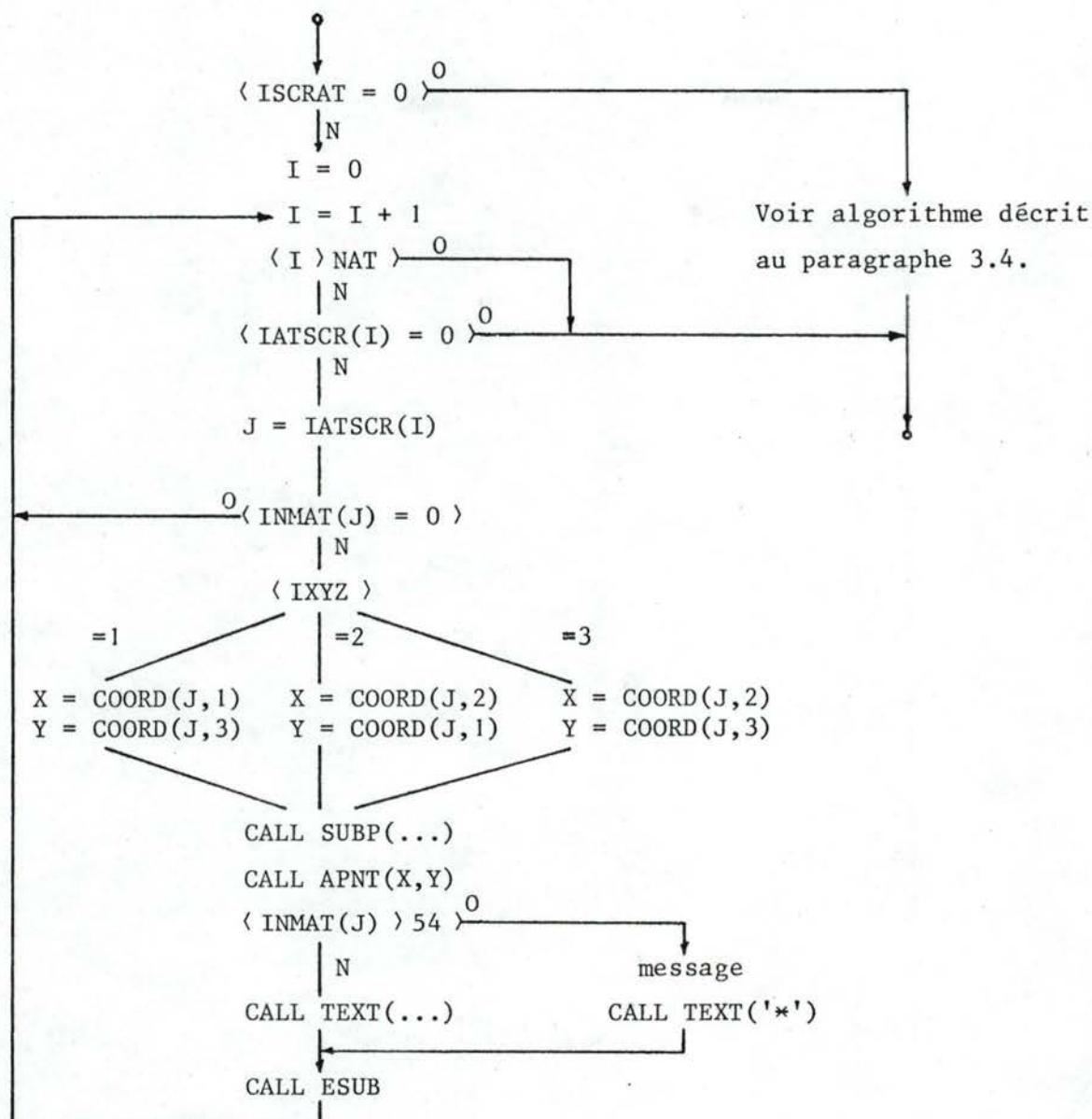
VII.4.1. Fonction : Permettre à l'utilisateur de dessiner non pas tous les atomes de la molécule mais un certain nombre d'atomes choisis par lui.

VII.4.2. Algorithme général : (sous-routine SCREAT)



Remarques :

- La variable ISCRAT indique si l'utilisateur souhaite que seulement quelques atomes soient dessinés à l'écran ou que tous les atomes de la molécule le soient.
- Nous allons compléter l'algorithme général de la sous-routine XYZPL, car il ne traite que le cas où ISCRAT = 0. Il faut donc ajouter un test sur ISCRAT et un algorithme traitant le cas où ISCRAT = 1. Cet algorithme est très semblable à celui déjà décrit. La différence réside dans le fait qu'il faille d'abord lire dans le vecteur IATSCR(I) les numéros des atomes à dessiner.

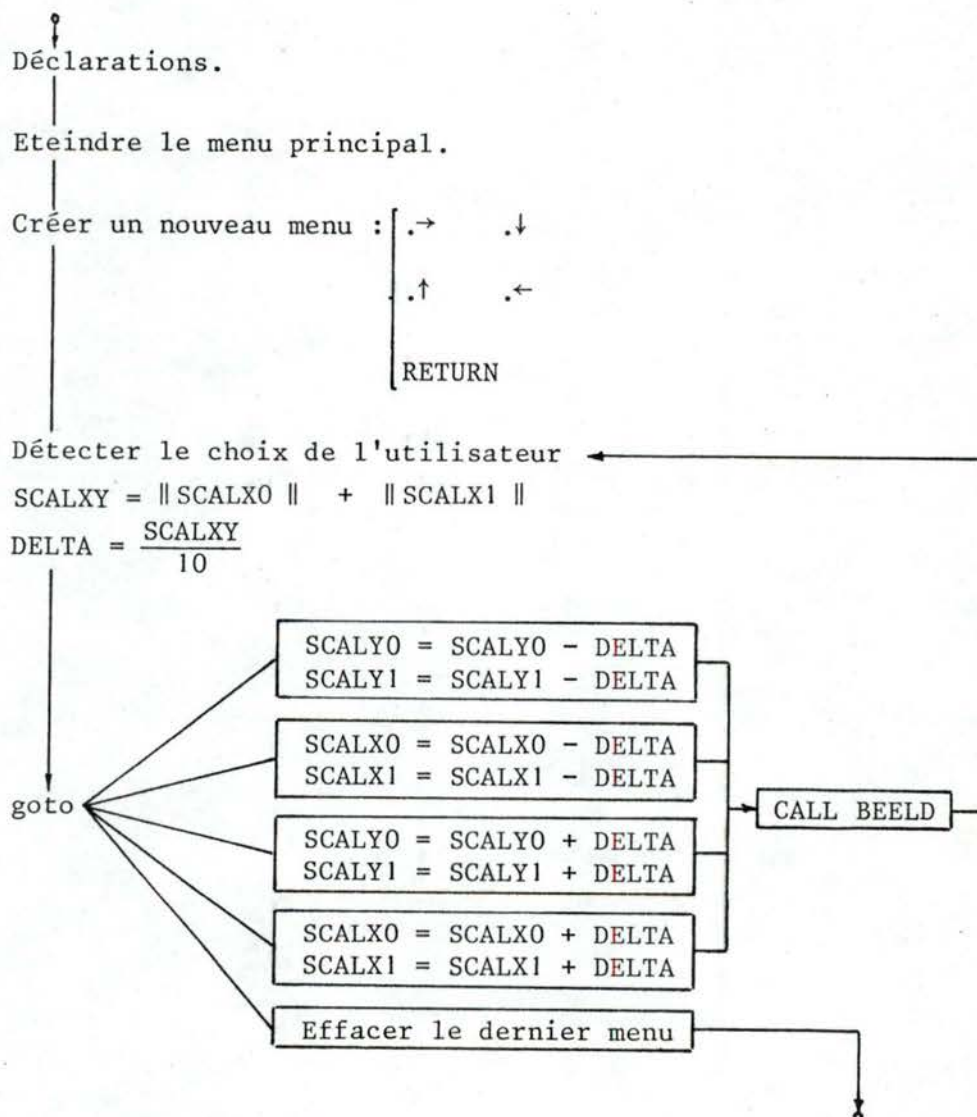


Cette remarque est également valable pour la sous-routine DUMAT qui dessine les atomes bidons.

VII. 5. Option "TRANSLATION OF AXES".

VII.5.1. *Fonction* : Initialement le centre du système de référence est situé dans la partie inférieure gauche de l'écran. Mais l'utilisateur peut, s'il le souhaite, déplacer l'image.

VII.5.2. Algorithme général : (sous-routine TRANSL)



VII.5.3. Remarques :

- L'algorithme est incomplet. Nous le complèterons avec l'option "TRANSLATION OF MOLECULE".
- Les paramètres SCALX0, SCALY0, SCALX1, SCALY1 déterminent l'échelle de l'écran via l'instruction : CALL SCAL(SCALX0, SCALY0, SCALX1, SCALY1).
- DELTA a été fixé arbitrairement à un dixième de l'échelle courante.

CHAPITRE VIII ROTATION ET TRANSLATION DE LA MOLECULE.

VIII. 1. Introduction :

Dans ce chapitre nous présentons deux options : ROTATION et TRANSLATION. La première concerne la rotation de la molécule dans le système de référence ainsi que la rotation d'un groupe chimique autour d'une liaison. La seconde effectue une translation de la molécule dans le système de référence.

VIII. 2. Translation.

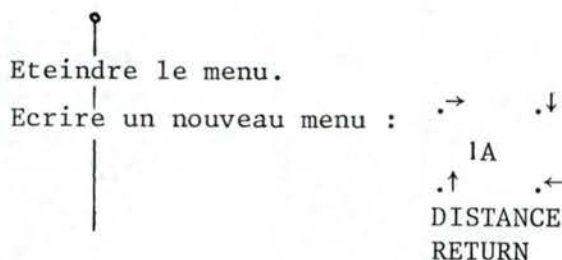
Fonction :

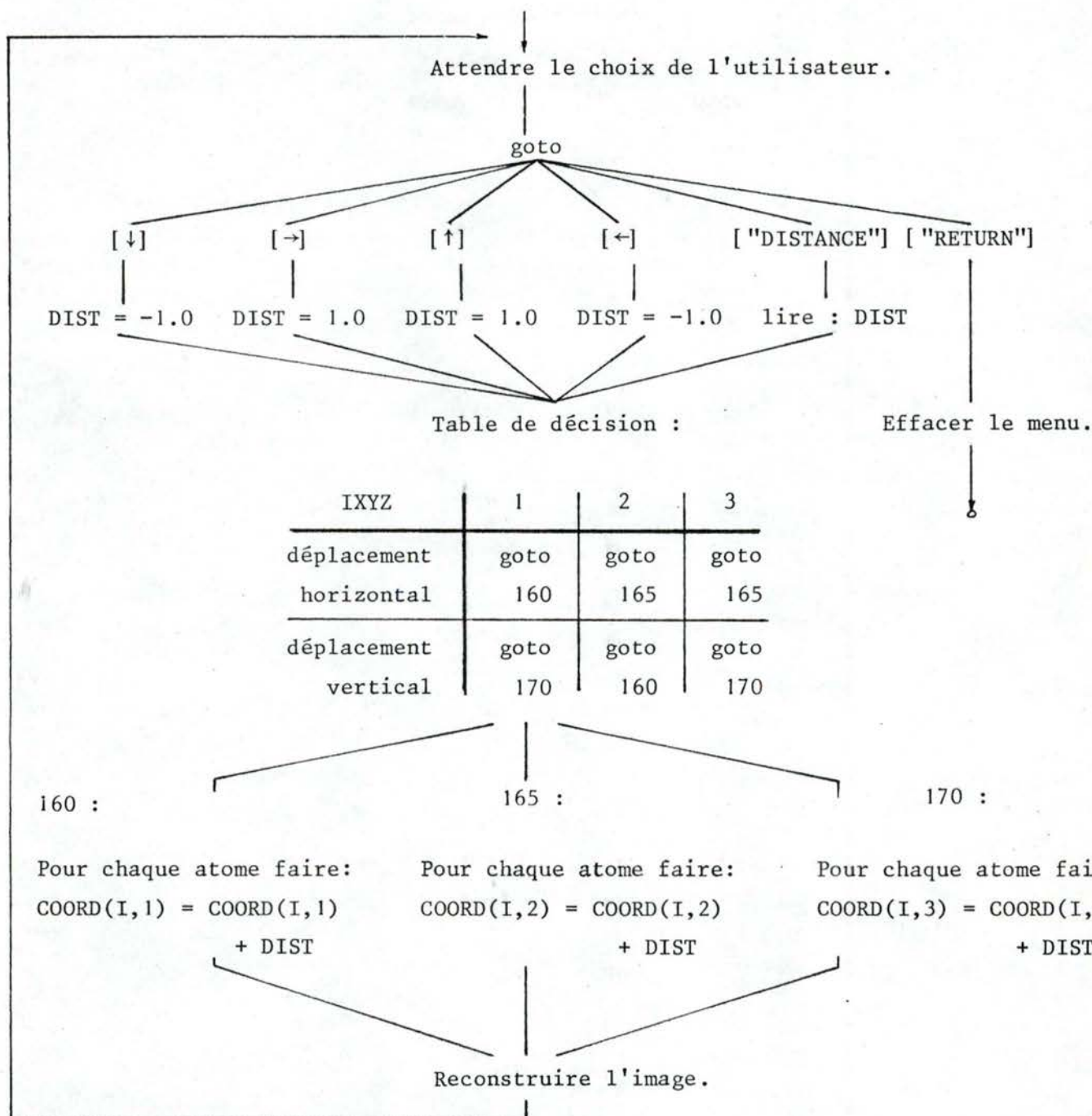
Cette option appelle un module qui présente le menu suivant : AXES, MOLECULE et RETURN. L'option "AXES" permet de translater les axes et donc l'image de la molécule à l'écran, sans modifier les coordonnées. Cette option a déjà été décrite ci-dessus (VII.5).

L'option "MOLECULE" opère une translation des coordonnées moléculaires dans le système de référence. Avec cette option un nouveau menu apparaît. Ici l'utilisateur a deux choix. Ou bien il souhaite une translation d'une unité et dans ce cas il indique avec le bic magnétique une des quatre flèches pour indiquer le sens du déplacement. Ou bien il souhaite introduire une valeur de déplacement et pour ce faire il indiquera l'option "DISTANCE". Ensuite il introduira via le terminal la donnée (signée) et répondra à la question : "Est-ce un déplacement horizontal ? (Y = oui, N = vertical)". Rappelons que l'image à l'écran est une projection de la molécule dans les plans XY, XZ ou YZ. Les coordonnées à modifier dépendent donc du plan de projection courant et du sens du déplacement.

Physiquement tous ces modules ont été rassemblés dans la même sous-routine TRANSL.

Algorithme général :





VIII. 3. Rotation :

Le module appelé présente un nouveau menu : MOLECULE
GROUP
RETURN

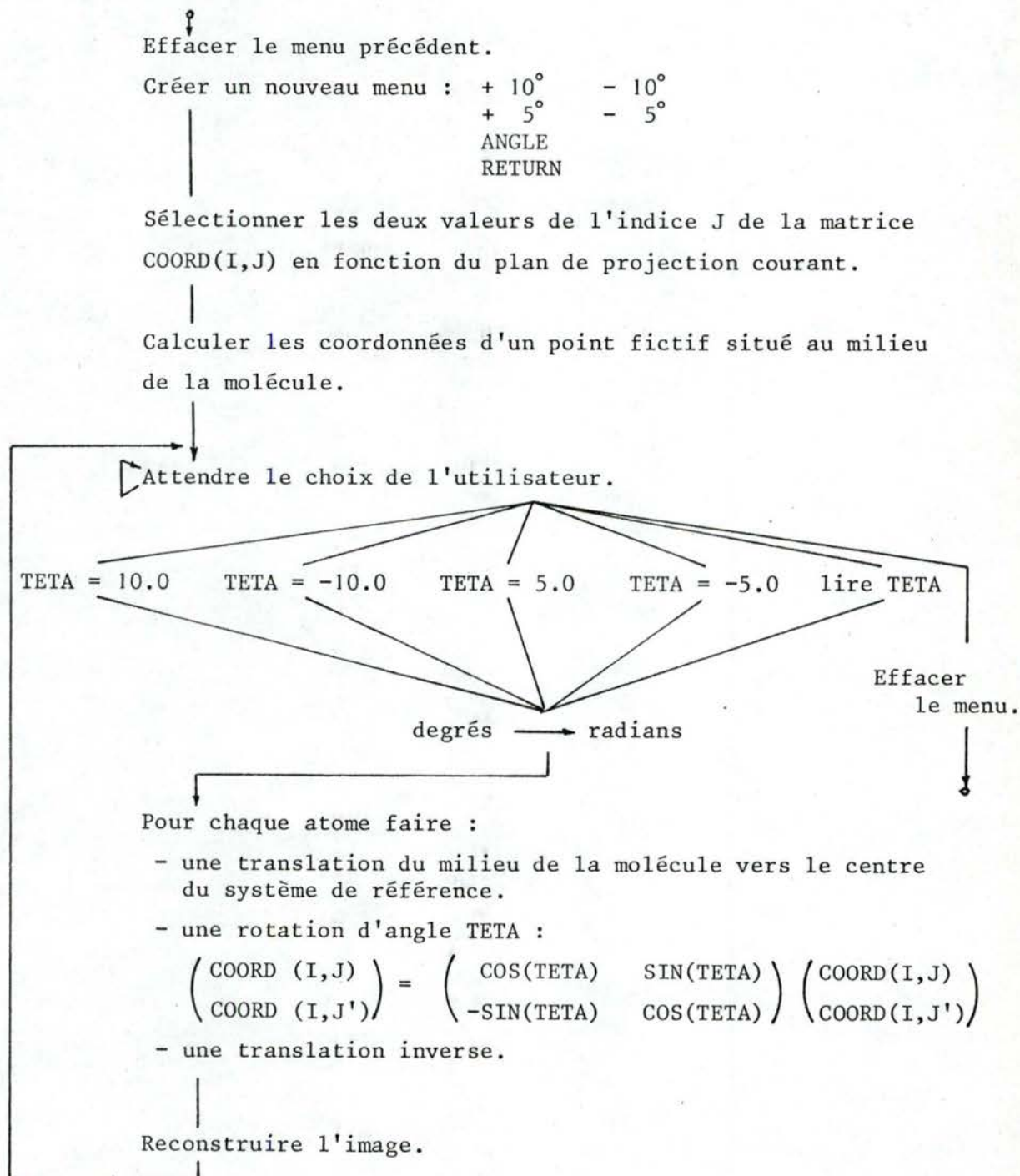
et appelle en fonction du choix de l'utilisateur, les modules correspondants.
Physiquement tous ces modules sont dans la sous-routine ROTAT.

A. Option "MOLECULE" :

A.1. Fonction :

Effectuer une rotation de la molécule autour d'un axe qui est perpendiculaire au plan de projection courant et passant par le milieu de la molécule.

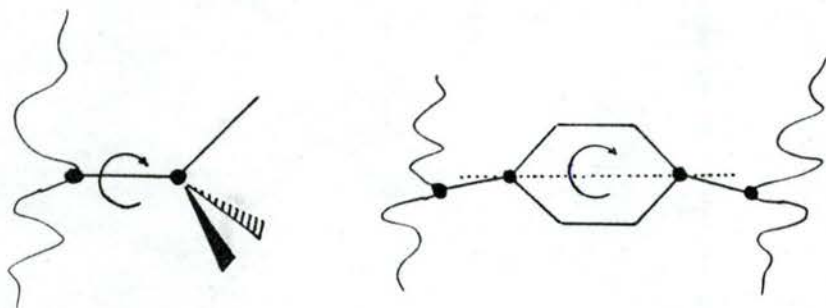
A.2. Algorithme général :



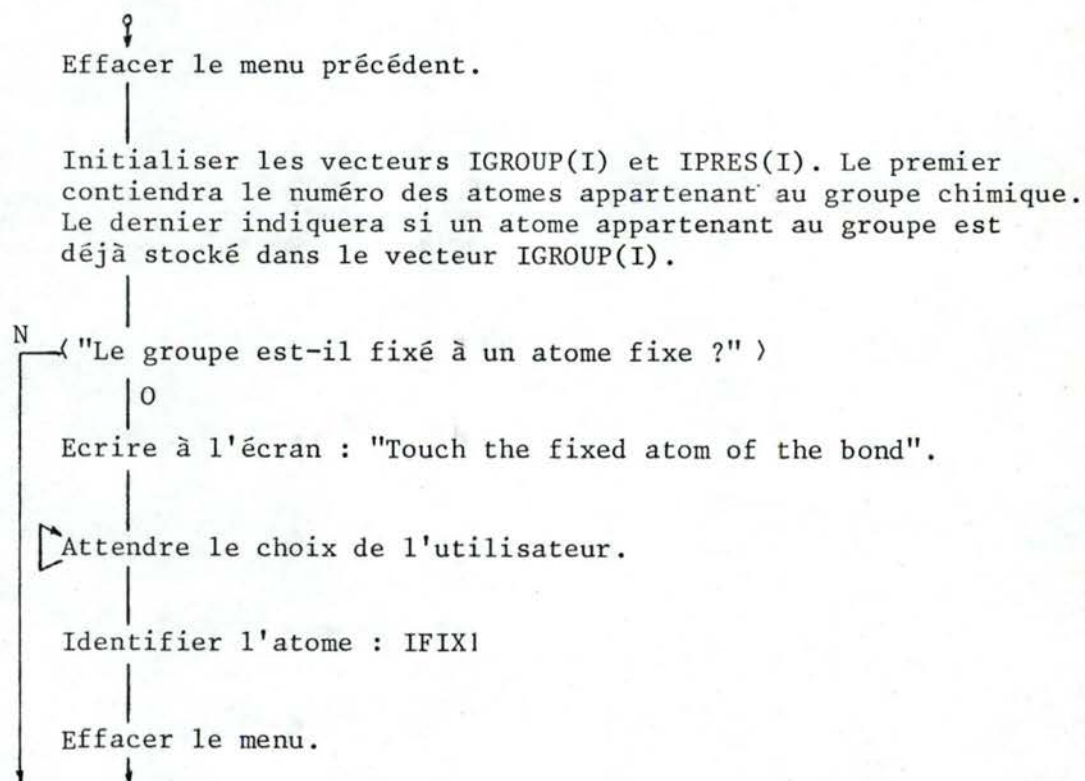
B. Option "GROUPE" :

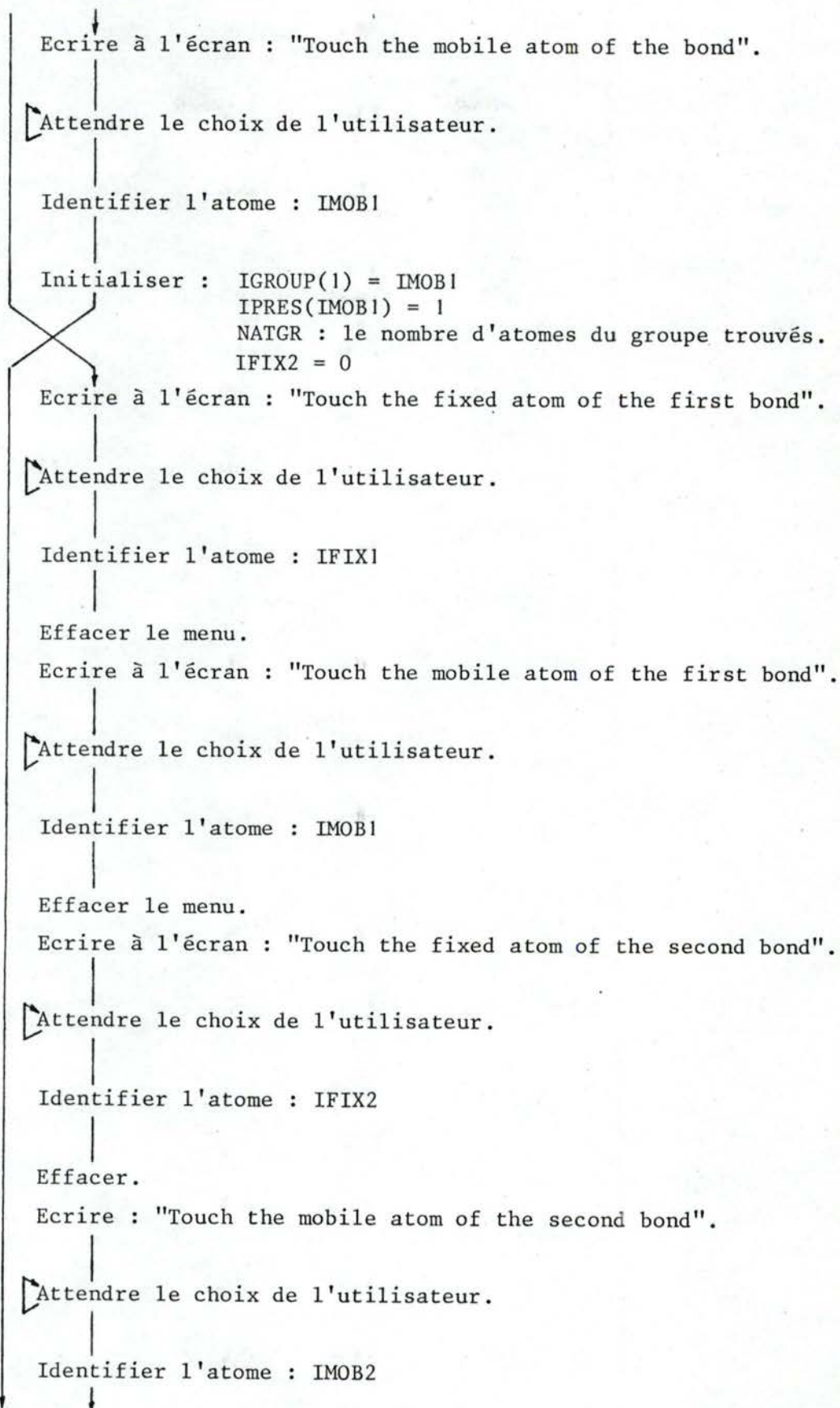
B.1. Fonction :

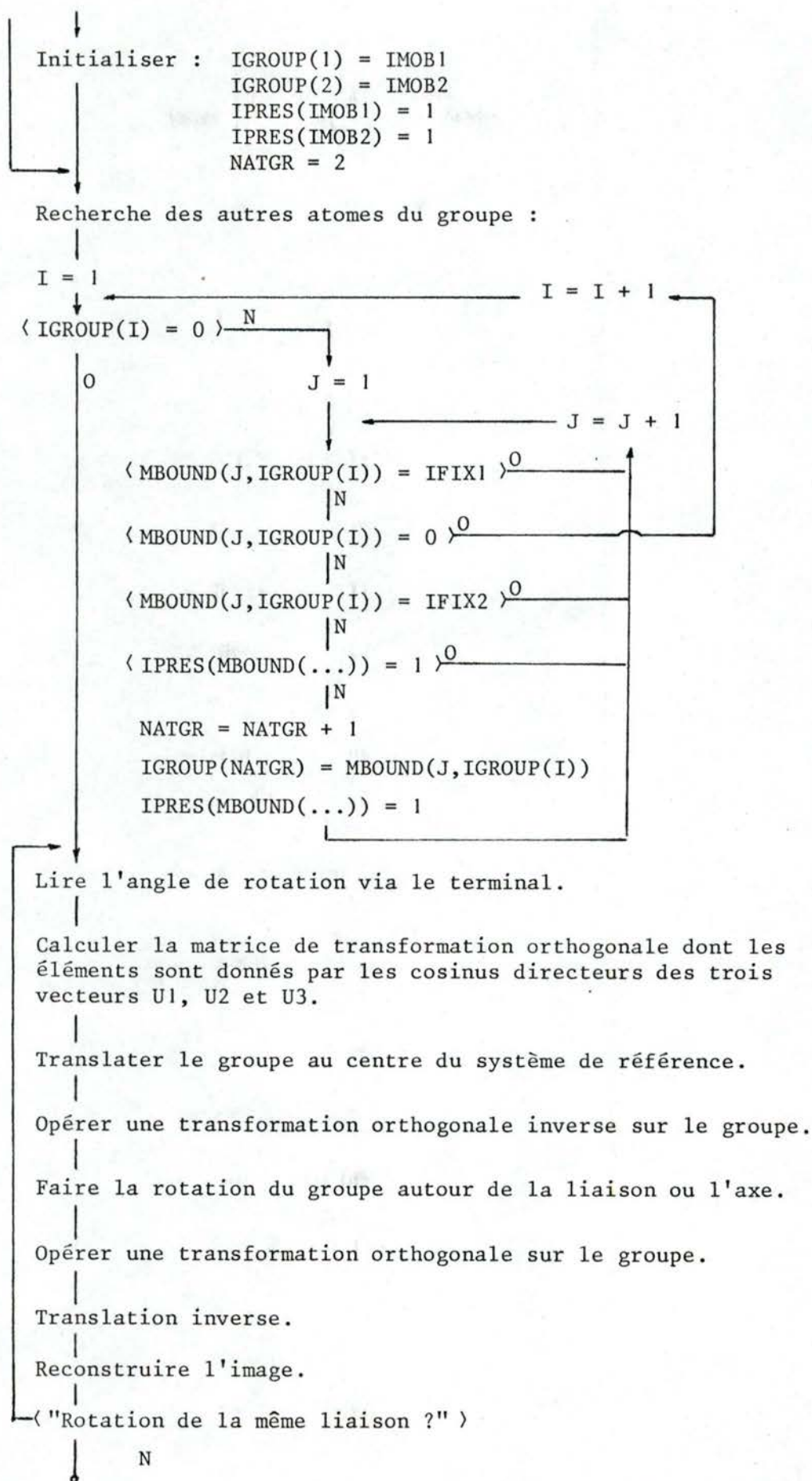
Réaliser la rotation d'un groupement chimique autour d'une liaison . Cette liaison étant définie par deux atomes : l'un "fixe" et l'autre "mobile". Nous avons également considéré le cas où le groupement chimique est lié par deux liaisons à la molécule. Dans ce cas la rotation se fera autour d'un axe passant par les deux atomes "mobiles" des liaisons. Notons que cette option ne peut fonctionner correctement que si les liaisons entre les atomes ont été indiquées lors de l'introduction des données.



B.2. Algorithme général :







CHAPITRE IX LES ENTREES ET LES SORTIES.

IX. 1. Les Entrées :

Deux options sont offertes. La première "DATA INPUT" permet d'introduire la Z-matrice soit par terminal soit par carte. L'organisation des données et leurs formats sont décrits au chapitre IV.3. Dès que les données sont introduites, les coordonnées cartésiennes sont calculées (sous-routine INPUT).

La deuxième option "SPIRAL MOLECULE" permet d'introduire les données nécessaires à la génération des coordonnées cartésiennes d'un polymère diatomique hélicé. Rappelons que la Z-matrice est un peu particulière. Quatre atomes bidons supplémentaires y sont définis et occupent les positions 1, 2, 5 et 6 de la Z-matrice. L'utilisateur ne doit pas les définir mais peut les utiliser comme point de repère. Il doit toutefois tenir compte de leur existence lorsqu'il construit l'unité monomérique. Leur rôle est décrit au chapitre V. 2. (sous-routine HELICE).

IX. 2. Les Sorties : (sous-routine OUTPUT)

Cette option permet d'imprimer au choix l'une des données suivantes : la Z-matrice, les coordonnées cartésiennes des atomes ou des atomes bidons ainsi que les distances interatomiques. Excepté pour la Z-matrice, l'utilisateur a le choix entre deux formats d'impression : un format "F" c-à-d F 12.8 et un format "D" c-à-d D 22.15. L'option "FOR006.DAT" permet de créer un fichier contenant le nombre d'atomes (I2), les atomes bidons exclus, et les coordonnées cartésiennes de ces atomes (D 23.16).

Tous les calculs sont effectués en double précision, ce qui signifie que l'utilisateur dispose de seize chiffres par nombre. Toutefois il devra répondre à la question suivante : "Voulez-vous maintenir tous les chiffres significatifs des coordonnées ?". Si la réponse est négative il répondra à la question : "Combien de chiffres significatifs voulez-vous ?". Après quoi toutes les coordonnées cartésiennes sont arrondies et tronquées de manière à contenir le nombre de chiffres significatifs souhaité (sous-routine ZERO).

Appendice A : PRINCIPALES VARIABLES ET LEUR SIGNIFICATION.

COORD(I,J) : Matrice contenant les coordonnées cartésiennes des atomes
(I = 1,...,50 ; J = 1,2,3) .

NAT : Nombre d'atomes dans la molécule (atomes bidons inclus).

BONDL(I) : Vecteur contenant les longueurs de liaison entre un atome I et
un atome J.

ALPHA(I) : Contient pour chaque atome I l'angle IJK.

BETA(I) : Contient pour chaque atome I l'angle dièdre IJKL.

IATOMS : Nombre d'atomes dans la molécule (atomes bidons exclus).

INMAT(I) : Variable contenant le numéro atomique de l'atome I.

IZ(I,J) : Matrice où pour chaque atome I la variable :

IZ(I,1) : indique l'atome J auquel il est lié

IZ(I,2) : indique l'atome K définissant l'angle \widehat{IJK}

IZ(I,3) : indique l'atome L définissant l'angle dièdre IJKL.

SCALX0, SCALY0, SCALX1, SCALY1 : Paramètres d'échelle destinés à l'écran.

IXYZ : Indique le plan dans lequel la molécule est projetée :

IXYZ = 1 plan ZX

IXYZ = 2 plan XY

IXYZ = 3 plan ZY

IDUMAT : Indique si les atomes bidons sont dessinés à l'écran ou pas.

IAXES : Indique si les axes de référence sont dessinés à l'écran ou pas.

IBOND : Indique si les liaisons sont dessinées à l'écran ou pas.

ISCRAT : Indique si seulement quelques atomes sont dessinés à l'écran ou
si tous les atomes de la molécule sont dessinés.

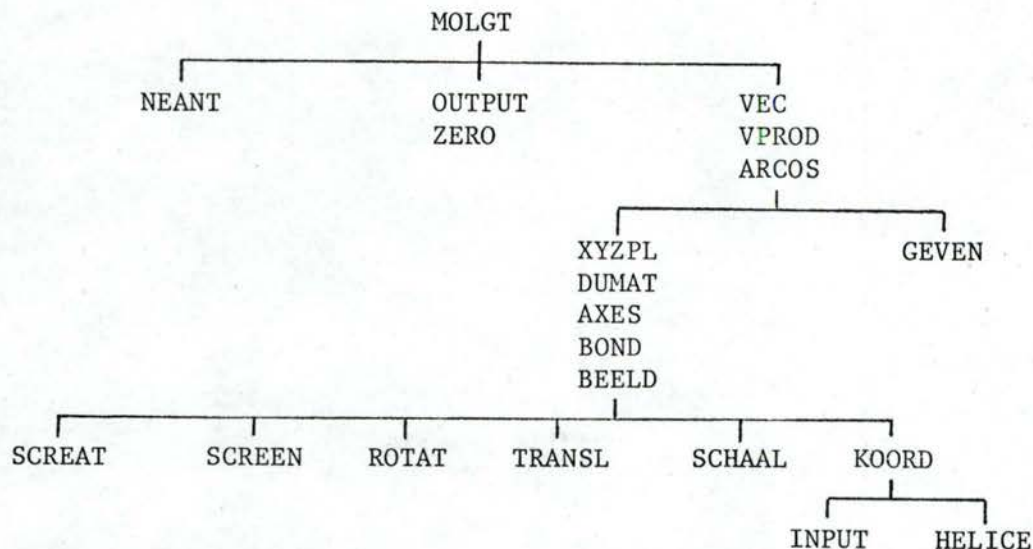
IATSCR(I) : Vecteur contenant les numéros des quelques atomes que l'utili-
sateur souhaite dessiner à l'écran.

MBOUND(I,J) : Matrice permettant de faire la description topologique de la
molécule.

L'élément MBOUND(I,J) contient le numéro de l'atome avec
lequel l'atome I fait une liaison.

Appendice B : STRUCTURE DE L'OVERLAY.

Structure :



Instructions :

```

.ROOT DD : MOLGT - DKO : [ 1,1] GLIB/LB - *(A1,A2,A3)
A1 : .FCTR (DD : NEANT - DKO : [ 1,1] GLIB/LB)
A2 : .FCTR (DD : OUTPUT - DD : ZERO - DKO : [ 1,1] GLIB/LB)
A3 : .FCTR (DD : VEC - DD : VPROD - DD : ARCOS - (B1,B2))
B1 : .FCTR (DD : GEVEN - DKO : [ 1,1] GLIB/LB)
B2 : .FCTR (DD : XYZPL - DD : DUMAT - DD : AXES - DD : BOND - DKO : [ 1,1]
          GLIB/LB - (B3))
B3 : .FCTR (DD : BEELD - DKO : [ 1,1] GLIB/LB - (C1,C4))
C1 : .FCTR ((DD : SCREAT - DKO : [ 1,1] GLIB/LB),(DD : SCREEN - DKO : [ 1,1]
          GLIB/LB),C2)
C2 : .FCTR ((DD : ROTAT - DKO : [ 1,1] GLIB/LB),(DD : TRANSL - DKO : [ 1,1]
          GLIB/LB),C3)
C3 : .FCTR (DD : SCHAAL -DKO : [ 1,1] GLIB/LB)
C4 : .FCTR (DD : KOORD - ((DD : INPUT - DKO : [ 1,1] GLIB/LB),(C5)))
C5 : .FCTR (DD : HELICE - DKO : [ 1,1] GLIB/LB)
.END
  
```

Link :

> ASN DK2 : = DD :

> TKB

TKB> DK2 : MOLGT, X/SH = DK2 : CASTOR/MP

OPTIONS :

> COMMON = DFILE : RW

> / /

Patienter pendant ~ 30 minutes

>

—

Appendice C : REMARQUES A PROPOS DE L'ACTION :

"ATTENDRE LE CHOIX DE L'UTILISATEUR".

La séquence d'instructions qui réalise cette action est la suivante :

```
1  CALL LPEN(IH,IT)
    IF(IH.EQ.0) GO TO 1
    GO TO (....,....) IT
    :
    GO TO 1
```

Où IH est une variable qui prend la valeur une lorsqu'il y a une interaction entre le bic magnétique et l'écran et qui a la valeur nulle lorsqu'aucune interaction n'a lieu. IT est une variable qui prend la valeur de l'identificateur de l'image avec laquelle il y a eu une interaction.

En réalisant cela par exemple dans la sous-routine SCHAAL, lorsque l'utilisateur indique une des deux options INCREASE ou DECREASE , il voit le dessin s'agrandir ou diminuer non pas une fois mais deux ! Cela est dû au fait que l'utilisateur maintient le bic magnétique pendant un certain temps contre l'écran. Pour remédier à cette situation nous avons ajouté un test :

```
1  CALL LPEN(IH,IT)
    IF(IH.EQ.0) GO TO 1
    IF(ITEST.EQ.1) GO TO 2
    ITEST = 1
    GO TO (....,....) IT
2  ITEST =0
    GO TO 1
```

Où la variable ITEST est initialisée à zéro.

Cette parade est inefficace dans le cas des modules de contrôle où deux, trois ou quatre "boucles d'attente" se suivent de très près. En effet, pendant le temps que l'utilisateur choisit un premier atome dans le but de connaître par exemple un angle, le processeur a le temps de sortir de la boucle et de traverser les deux boucles d'attente suivantes. Et par conséquent les trois atomes déterminant un angle sont identiques !

Pour y remédier nous avons procédé comme suit :

```
      IHIT = 0
1     CALL LPEN(IH,IT)
      IF(IH.EQ.0) GO TO 1
      IHIT = IHIT + IH
      IF(IHIT.LE.6) GO TO 1
      :
      :
      IHIT =0
2     CALL LPEN(IH,IT)
      IF(IH.EQ.0) GO TO 2
      IHIT = IHIT + IH
      IF(IHIT.LE.6) GO TO 2
```

Appendice D : 1. LES IDENTIFICATEURS D'IMAGE UTILISES.

- 1 - 23 : menu du programme MOLGT
- 24 - 30 : menu de la sous-routine INPUT
- 31 : ensemble des atomes bidons
- 33 : un mini système d'axes ; sous-routine XYZPL
- 34 : ensemble des liaisons ; sous-routine BOND
- 35 : système d'axes de référence
- 40 - 50 : menu de la sous-routine SCREEN
- 51 - 53 : menu de la sous-routine SCHAAAL
- 54 - 62 : menu de la sous-routine TRANSL
- 70 - 75 : menu de la sous-routine ROTAT
- 80 - 95 : menu de la sous-routine OUTPUT
- 100 - 101 : menu de la sous-routine NEANT
- 110 - 135 : menu de la sous-routine GEVEN
- 200 - 249 : les atomes

BIBLIOGRAPHIE.

1. M.F. LYNCH, J.M. HARRISSON, W.G. TOWN & J.E. ASH
Computer Handling of Chemical Structure Information (1971)
2. Prof. R. DE GROOTE
Géométrie (1975-76) P.U.B.
3. P.C. AITCIN, P. LOUQUET, A. VOGT
Géométrie. (Application de l'algèbre linéaire et de l'analyse
à la géométrie) (1973).
4. Mad. C. READ-DERCHAIN
Géométrie Analytique à trois dimensions (1966)
(Première Partie)
5. T. SHIMANOUCI & S-I. NIZUSHIMA
On the Helical Configuration of a Polymer Chain.
(The Journal of Chemical Physics, 23-4, april 1955)
6. H. SUGETA & T. MIYAZAWA
General Method for Calculating Helical Parameters of Polymer
Chains from Bond Lengths, Bond Angles, and Internal -
Rotation Angles.
(Biopolymers, Vol. 5 - pp. 673-679, 1967)
7. La Documentation concernant le système d'exploitation.
8. RSX-11M/FORTRAN, Graphics Extensions, User's Guide.
9. R.I. KITAIGORODSKY
Molecular Crystals and Molecules (1973)

LISTE DES SOUS-ROUTINES :

MOLGT
AXES
ARCOS
BEELD
BOND
DUMAT
GEVEN
HELICE
INPUT
KOORD
NEANT
OUTPUT
ROTAT
SCHAAL
SCREAT
SCREEN
TRANSL
VEC
VPROD
XYZPL
ZERO


```

C      PROGRAM      * MOLGT *
C
01      REAL*8 COORD,BONDL,ALPHA,BETA
02      COMMON/DFILE/IRUF(4000)
03      COMMON/COORD/COORD(50,3),NAT,SCALX0,SCALY0,SCALX1,SCALY1,IATOMS
04      COMMON/ZMAT/INMAT(50),IZ(50,3),BONDL(50),ALPHA(50),BETA(50)
05      COMMON/PARAM/IXYZ,IDUMAT,IAXES,ITEST,IBOND,ISCRAT
06      COMMON/SCREAT/IATSCR(50)
07      COMMON/BOND/MBOUND(8,50)
08      COMMON/TITEL/LABEL(20)
09      CALL ASSIGN(1,'GR0:',4)
10      CALL ASSIGN(2,'LP:',3)
11      CALL ASSIGN(3,'C:',3)
12      CALL ASSIGN(4,'TI:',3)
13      CALL ASSIGN(6,'DK0:',4)
C      INITIALISATION.
C
14      131 NAT=0
15      ITEST=0
16      IXYZ=1
17      IDUMAT=0
18      IAXES=0
19      IBOND=0
20      IATOMS=0
21      SCALX0=-4.
22      SCALY0=-4.
23      SCALX1=16.
24      SCALY1=16.
25      DO 22 I=1,0
26      DO 22 J=1,50
27      22 MBOUND(I,J)=0
28      ISCRAT=0
C
29      CALL INIT(4000)
30      CALL SCAL(0.,0.,1023.,1023.)
C      MAIN MENU.
31      CALL MENU(910.,100.,20.,1,'MODIFIC')
32      CALL SUBP(22)
33      CALL APNT(910.,140.,0,-8)
34      CALL TEXT(' MOLEC')
35      CALL ESUB
36      CALL MENU(910.,160.,40.,2,'SPIRAL','ROTATE','TRANSL')
37      CALL SUBP(15)
38      CALL APNT(910.,280.,0,-8)
39      CALL TEXT(' ATOM')
40      CALL ESUB
41      CALL SUBP(16)
42      CALL APNT(910.,340.,0,-8)
43      CALL TEXT(' ATOMS')
44      CALL ESUB
45      CALL MENU(910.,300.,60.,5,'ERASE','SCREEN')
46      CALL MENU(910.,440.,60.,14,'SCREEN')
47      CALL SUBP(23)
48      CALL APNT(910.,420.,0,-8)

```



```

49      CALL TEXT(' MOLEC')
50      CALL ESUB
51      CALL SUBP(17)
52      CALL APNT(910,,400,,0,-8)
53      CALL TEXT(' MOLEC')
54      CALL ESUB
55      CALL SUBP(18)
56      CALL APNT(910,,540,,0,-8)
57      CALL TEXT(' SCREEN')
58      CALL ESUB
59      CALL SUBP(19)
60      CALL APNT(910,,600,,0,-8)
61      CALL TEXT(' OUTPUT')
62      CALL ESUB
63      CALL SUBP(20)
64      CALL APNT(910,,660,,0,-8)
65      CALL TEXT(' INPUT')
66      CALL ESUB
67      CALL MENU(910,,500,,60,,7,'DRAW','DATA','DATA','DATA','SCALE')
68      CALL SUBP(21)
69      CALL APNT(910,,820,,0,-8)
70      CALL TEXT(' AGAIN')
71      CALL ESUB
72      CALL MENU(910,,780,,60,,12,'EXIT','BEGIN')
73      GO TO 15

C          CALL ON THE MAIN MENU.
74      16 DO 20 I=1,23
75      20 CALL ON(I)

C          WAIT FOR USERS DECISION.
76      15 CALL LPEN(IH,IT)
77      IF(IH.EQ.0)GO TO 15
79      GO TO (1,2,3,4,5,6,7,8,9,10,11,12,13,14)IT
80      GO TO 15

C
81      1 CALL NEANT
82      GO TO 16

C          INPUT OF A HELICAL DIATOMIC CHAIN.
83      2 IF(ITEST.EQ.1) GO TO 23
85      ITEST=1
86      CALL HELTCE
87      GO TO 16
88      23 ITEST=0
89      GO TO 16

C          ROTATION OF THE MOLECULE
90      3 CALL ROTAT
91      GO TO 16

C          TRANSLATION OF AXES OR MOLECULE.
92      4 CALL TRANSL
93      GO TO 16
94      5 CALL NEANT
95      GO TO 16

C          SCREEN ONLY A FEW ATOMS OF THE MOLECULE.
96      6 IF(ITEST.EQ.1) GO TO 66
98      ITEST=1

```



```
009          CALL SCREAT
010          GO TO 16
011      66 ITEST=0
012          GO TO 16
013      7 CALL NEANT
014          GO TO 16
015      C          SCREEN DATAS.
016      8 CALL GEVEN
017          GO TO 16
018      C          PRINT DATAS.
019      9 CALL OUTPUT
020          GO TO 16
021      C          READ DATAS.
022      10 CALL INPUT
023          GO TO 16
024      C          CHANGE SCALE
025      11 CALL SCHAAL
026          GO TO 16
027      C          END OF PROGRAM
028      12 GO TO 17
029      C          BEGIN AGAIN.
030      13 CALL FREE
031          GO TO 131
032      C          DISPLAY OR ERASE DUMMY ATOMS, AXES, BONDS,
033      C          PROJECT THE MOLECULE IN AN OTHER PLANE.
034      14 CALL SCREEN
035          GO TO 16
036      C
037      17 STOP
038      END
```



```

01      SUBROUTINE AXES
02      REAL*8 COORD
03      COMMON/DRILE/IBUF(4000)
04      COMMON/COORD/COORD(50,3),NAT,SCALX0,SCALY0,SCALX1,SCALY1,IATOMS
05      COMMON/PARAM/IXYZ,IDUMAT,IXES,ITEST,IBOND,ISCRAT
06
07      C
08      C          DISPLAY REFERENCE AXES.
09      C
10      CALL SCAL(SCALX0,SCALY0,SCALX1,SCALY1)
11
12      C
13      CALL SUBP(35)
14      XY=ABS(SCALX0)+ABS(SCALX1)
15      CALL APNT(-2.,0.,0,-4,-1)
16      CALL LVECT(8.,0.)
17      YX=XY*12./1023.
18      CALL RDOT(0.,-YX,0,-4)
19      CALL TEXT(-1,'W')
20      CALL APNT(0.,-2.,0,-4)
21      CALL LVECT(0.,8.)
22      YX=YX/2.
23      CALL RDOT(-YX,-YX,0,-4)
24      CALL TEXT(-1,'Y')
25      XY=XY*22./1023.
26      CALL APNT(1.,0.,0,6)
27      CALL APNT(1.,-XY,0,-4)
28      CALL TEXT(-1,'A')
29      CALL APNT(6.,-XY,0,-4)
30      GO TO (10,20,30) IXYZ
31      10 CALL TEXT('X')
32      GO TO 30
33      20 CALL TEXT('Y')
34      30 CALL APNT(-XY,6.,0,-4)
35      GO TO (50,40,50) IXYZ
36      40 CALL TEXT('X')
37      GO TO 60
38      50 CALL TEXT('Z')
39      60 XY=XY*1.5
40      CALL APNT(0.,1.,0,6)
41      CALL APNT(-XY,1.,0,-4)
42      CALL TEXT(-1,'A')
43      CALL ESUB
44
45      C
46      4 RETURN
47      END

```


RTRAN IV V010-03C
RE=00K, UIC=[11,15]

SUN 14-MAY-78 16:41:05

PAGE 001

DK1:,ARCOS/LI:1/NOSP=DK1:ARCOS.

```
01      FUNCTION ARCOS(A)
02      IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
03      DATA PI/3.141592653589793D0/
04      IF(A) 1,2,1
05      1 DIF=DSQRT(1.0D0-(A*A))/A
06      IF(DIF) 5,6,6
07      5 DIF=-DIF
08      ARCOS=PI-DATAN(DIF)
09      RETURN
10      6 ARCOS=DATAN(DIF)
11      RETURN
12      2 ARCOS=PI/2.0D0
13      3 RETURN
14      END
```


RTNAN IV V01C-03C
RE=0BK, UIC=[11,15]

SUN 14-MAY-78 16:41:46

PAGE 001

DK11,BEELD/LI:1/NOSP=DK1:BEELD.

```
01      SUBROUTINE BEELD
02      COMMON/PARAM/IXYZ,IDUMAT,IAXES,ITEST,IBOND,ISCRAT
      C      RECONSTRUCTION OF THE PICTURE
03      110 CALL XYZPL
04      IF(IDUMAT.EQ.0) GO TO 111
05      CALL DUMAT
06      111 IF(IAXES.EQ.0) GO TO 112
07      CALL AXES
08      112 IF(IBOND.EQ.0) GO TO 113
09      CALL BOND
10      113 RETURN
11      END
```



```

01      SUBROUTINE BOND
02      REAL*8 COORD
03      COMMON/DFILE/IRUF(4000)
04      COMMON/COORD/COORD(50,3),NAT,SCALX0,SCALY0,SCALX1,SCALY1
05      COMMON/PARAM/IXYZ,IDUNAT,IAXES,ITEST,IBOND,ISCRAT
06      COMMON/BOND/MBOUND(8,50)
07      CALL SCAL(SCALX0,SCALY0,SCALX1,SCALY1)
08      CALL SUBP(34)
09      DO 56 J=2,NAT
10      I=1
11      1 IF(MBOUND(I,J).EQ.0) GO TO 55
13      IF(MBOUND(I,J).GT.J) GO TO 50
15      II=MBOUND(I,J)
16      X1=SNGL(COORD(II,1))
17      Y1=SNGL(COORD(II,2))
18      Z1=SNGL(COORD(II,3))
19      X2=SNGL(COORD(J,1))
20      Y2=SNGL(COORD(J,2))
21      Z2=SNGL(COORD(J,3))
22      IF(IXYZ.NE.1) GO TO 5
24      DY=Z2-Z1
25      DX=X2-X1
26      Y=Z1
27      X=X1
28      Z1=-Y1
29      Z2=-Y2
30      GO TO 15
31      5 IF(IXYZ.NE.2) GO TO 10
33      DX=Y2-Y1
34      DY=X2-X1
35      X=Y1
36      Y=X1
37      Z1=-Z1
38      Z2=-Z2
39      GO TO 15
40      10 DY=Z2-Z1
41      DX=Y2-Y1
42      Y=Z1
43      X=Y1
44      Z1= X1
45      Z2= X2
46      15 IF(ABS(Z1).LT.0.00001) GO TO 25
48      IF(Z1) 20,25,30
49      20 IF(Z2=0.00001) 41,41,42
50      25 IF(ABS(Z2).LT.0.00001) GO TO 43
52      IF(Z2) 41,43,44
53      30 IF(Z2=0.00001) 42,44,44
54      41 II=4
55      II=3
56      GO TO 45
57      42 II=6
58      II=3
59      GO TO 45
60      43 II=4

```


RTRAN IV VOIC=03C
RE=08K, UIC=[11,15]

SUN 14-MAY-78 16:42:14

PAGE 002

DK1:,BOND/LI:1/NOSP=DK1:BOND.

```

61      TT=1
62      GO TO 45
63      44 TI=6
64      TT=1
65      45 CALL APNT(X,Y,0,-1)
66      CALL LVECT(DX,DY,0,II,0,TT)
67      50 I=I+1
68      GO TO 1
69      55 CONTINUE
70      56 CONTINUE
71      CALL ESUB
72      RETURN
73      END

```



```

01 SUBROUTINE DUMAT
02
03     THIS SUBROUTINE DISPLAYS ONLY THE DUMMY ATOMS.
04
05
06
07
08
09
10
11
12
13
14
15
16
17
18
19
20
21
22
23
24
25
26
27
28
29
30
31
32
33
34
35
36
37
38
39
40
41
42
43
44
45
46
47
48
49
50
51
52
53
54
55
56
57
58
59
60
61
62
63
64
65
66
67
68
69
70
71
72
73
74
75
76
77
78
79
80
81
82
83
84
85
86
87
88
89
90
91
92
93
94
95
96
97
98
99

```


PTAN IV VOIC=030
PE=08K, UIC=[11,15]

SUN 14-MAY-78 16:42:54

PAGE 002

DK1:,DUMAT/LI:1/NOSP=DK1:DUMAT.

```
45 41 Y=SNGL(COORD(J,3))
46 IF(IXYZ.EQ.3) GO TO 44
48 X=SNGL(COORD(J,1))
49 44 ITAG=J+109
50 CALL SUBP(ITAG)
51 CALL APNT(X,Y,1,6)
52 CALL RDOT(0.,0.,1,6,1)
53 CALL TEXT('D')
54 CALL ESUP
55 45 CONTINUE
56 4 CALL ESUP
57 CALL RDOT(0.,0.,0,0,-1)
58 2 RETURN
59 END
```



```

01 SUBROUTINE GEVEN
02 REAL*8 COORD,DIST,R,U1,U2,COXA,VP,U3,PI
03 COMMON/DFILE/IRUF(4000)
04 COMMON/COORD/COORD(50,3),NAT,SCALX0,SCALY0,SCALX1,SCALY1,TATOMS
05 DIMENSION U1(3),U2(3),U3(3),VP(3)
06 DATA PI/3.14159265358979300/
07 CALL SCAL(0.,0.,1023.,1023.)

```

C

```

08 DO 1 I=1,7
09 1 CALL OFF(I)
10 DO 2 I=9,17
11 2 CALL OFF(I)
12 DO 3 I=19,23
13 3 CALL OFF(I)
14 CALL SUBP(117)
15 CALL OFF(117)
16 CALL APNT(760.,900.,0,-8)
17 CALL TEXT('DIST =')
18 CALL ESUB
19 CALL SUBP(118)
20 CALL OFF(118)
21 CALL APNT(740.,900.,0,-8)
22 CALL TEXT('ANGLE =')
23 CALL ESUB
24 CALL SUBP(119)
25 CALL OFF(119)
26 CALL APNT(615.,900.,0,-8)
27 CALL TEXT('DIHEDRAL ANGLE =')
28 CALL ESUB
29 CALL SUBP(120)
30 CALL OFF(120)
31 CALL APNT(600.,940.,0,-8)
32 CALL TEXT('TOUCH A FIRST ATOM.')
33 CALL ESUB
34 CALL SUBP(121)
35 CALL OFF(121)
36 CALL APNT(600.,940.,0,-8)
37 CALL TEXT('TOUCH A SECOND ATOM.')
38 CALL ESUB
39 CALL SUBP(122)
40 CALL OFF(122)
41 CALL APNT(600.,940.,0,-8)
42 CALL TEXT('TOUCH A THIRD ATOM.')
43 CALL ESUB
44 CALL SUBP(123)
45 CALL OFF(123)
46 CALL APNT(600.,940.,0,-8)
47 CALL TEXT('TOUCH A FOURTH ATOM.')
48 CALL ESUB
49 CALL SUBP(124)
50 CALL OFF(124)
51 CALL APNT(600.,940.,0,-8)
52 CALL TEXT('IS HE DEFINED BY ATOMS 2 AND 3?')
53 CALL ESUB

```



```

54 CALL SUBP(125)
55 CALL OFF(125)
56 CALL APNT(390.,940.,0,-8)
57 CALL TEXT('FIRST PLANE : ')
58 CALL ESUB
59 CALL SUBP(126)
60 CALL OFF(126)
61 CALL APNT(390.,940.,0,-8)
62 CALL TEXT('SECOND PLANE : ')
63 CALL ESUB
64 CALL SUBP(127)
65 CALL OFF(127)
66 CALL APNT(850.,900.,0,-8)
67 CALL NMBR(129,DIST,12,'(F10.6)')
68 CALL ESUB
69 CALL SUBP(128)
70 CALL OFF(128)
71 CALL APNT(840.,900.,0,-8)
72 CALL NMBR(130,COSA,13,'(F11.6)')
73 CALL ESUB

```

C

NEW MENU

```

74 CALL MENU(910.,260.,40.,110,'RETURN','IN PLANE')
75 CALL SUBP(116)
76 CALL APNT(910.,340.,0,-8)
77 CALL TEXT('    ANGLE')
78 CALL ESUB
79 CALL MENU(910.,360.,40.,112,'DIHEDRAL','BOND ANG','DISTANCE',
1 'COORDIN')
80 GO TO 6

```

C

```

81 4 DO 5 I=111,116

```

```

82 5 CALL ON(I)

```

C

WAIT USERS DECISION.

```

83 6 CALL LPEN(IH,IT)
84 IF(IH.EQ.0) GO TO 6
85 IF(ITEST.EQ.1) GO TO 7
86 ITEST=1
87 IT=IT+100
88 GO TO(100,100,40,30,20,10) IT
89 7 ITEST=0
90 GO TO 6

```

C

SCREENS THE COORDINATES OF A CHOSEN ATOM.

C

```

93 10 DO 11 I=111,114

```

```

94 11 CALL OFF(I)

```

```

95 CALL OFF(116)

```

C

NEW MENU.

```

96 CALL SUBP(131)
97 CALL APNT(510.,940.,0,-8)
98 CALL TEXT('PLEASE TOUCH THE ATOM FOR WHICH')
99 CALL APNT(510.,920.,0,-8)
100 CALL TEXT('YOU WANT TO KNOW THE COORDINATES :')
101 CALL APNT(800.,890.,0,-8)

```



```

02 CALL TEXT('X =')
03 CALL APNT(800.,870.,0,-8)
04 CALL TEXT('Y =')
05 CALL APNT(800.,850.,0,-8)
06 CALL TEXT('Z =')
07 CALL ESUB
08 CALL SUBP(132)
09 CALL OFF(132)
10 CALL APNT(850.,890.,0,-8)
11 CALL NMBR(133,COORD(IT,1),12,'(F10.6)')
12 CALL APNT(850.,870.,0,-8)
13 CALL NMBR(134,COORD(IT,2),12,'(F10.6)')
14 CALL APNT(850.,850.,0,-8)
15 CALL NMBR(135,COORD(IT,3),12,'(F10.6)')
16 CALL ESUB

```

C WAIT USERS DECISION.

```

17 14 CALL LPEN (IH,IT)
18 IF(IH.EQ.0) GO TO 14
19 IF(IT.EQ.110) GO TO 15
20 IF(IT.LT.200.OR.IT.GT.249) GO TO 14
21 IT=IT-199
22 CALL ON(132)
23 CALL NMBR(133,COORD(IT,1),12,'(F10.6)')
24 CALL NMBR(134,COORD(IT,2),12,'(F10.6)')
25 CALL NMBR(135,COORD(IT,3),12,'(F10.6)')
26 GO TO 14
27 15 DO 16 I=131,135
28 16 CALL ERAS(I)
29 CALL CMPS
30 GO TO 4

```

C
 C SCREENS THE DISTANCE BETWEEN 2 CHOSEN ATOMS.
 C

```

34 20 DO 21 I=111,113
35 21 CALL OFF(I)
36 CALL OFF(115)
37 CALL OFF(116)

```

C NEW MENU

```

38 CALL ON(117)
39 CALL ON(120)

```

C WAIT USERS DECISION.

```

40 IHIT=0
41 22 CALL LPEN(IH,IT)
42 IF(IH.EQ.0) GO TO 22
43 IHIT=IHIT+IH
44 IF(IHIT.LE.6) GO TO 22
45 CALL OFF(127)
46 IF(IT.EQ.110) GO TO 25
47 IF(IT.LT.200.OR.IT.GT.249) GO TO 22
48 CALL OFF(110)
49 IT=IT-199
50 CALL OFF(120)
51 CALL ON(121)
52 IHIT=0

```



```

57 23 CALL LPEN(IH,JT)
58 IF(IH.EQ.0) GO TO 23
59 IHIT=IHIT+IH
60 IF(IHIT.LE.6) GO TO 23
61 IF(JT.LT.200.OR.JT.GT.249) GO TO 23
62 JT=JT-199
63 DIST=0.000
64 DO 24 I=1,3
65 R=COORD(IT,I)=COORD(JT,I)
66 24 DIST=DIST+R*R
67 DIST=DSQRT(DIST)
68 CALL ON(127)
69 CALL NMBR(129,DIST,12,'(F10.6)')
70 CALL OFF(121)
71 CALL ON(110)
72 CALL ON(120)
73 IHIT=0
74 GO TO 22
75 25 CALL OFF(117)
76 CALL OFF(120)
77 GO TO 4

```

SCREENS THE ANGLE BETWEEN TWO BONDS.

```

81 30 CALL OFF(111)
82 CALL OFF(112)
83 DO 31 I=114,116
84 31 CALL OFF(I)
85 NEW MENU.
86 CALL ON(120)
87 CALL ON(118)
88 WAIT USERS DECISION.
89 IHIT=0
90 32 CALL LPEN(IH,IT)
91 IF(IH.EQ.0) GO TO 32
92 IHIT=IHIT+IH
93 IF(IHIT.LE.6) GO TO 32
94 CALL OFF(128)
95 IF(IT.EQ.110) GO TO 35
96 IF(IT.LT.200.OR.IT.GT.249) GO TO 32
97 CALL OFF(110)
98 IT=IT-199
99 CALL OFF(120)
100 CALL ON(121)
101 IHIT=0
102 33 CALL LPEN(JH,JT)
103 IF(JH.EQ.0) GO TO 33
104 IHIT=IHIT+JH
105 IF(IHIT.LE.6) GO TO 33
106 IF(JT.LT.200.OR.JT.GT.249) GO TO 33
107 JT=JT-199
108 CALL OFF(121)
109 CALL ON(122)
110 IHIT=0

```



```
16 34 CALL LPEN(KH,KT)
17 IF(KH.EQ.0) GO TO 34
18 IHIT=IHIT+KH
19 IF(IHIT.LE.6) GO TO 34
20 IF(KT.LT.200.OR.KT.GT.249) GO TO 34
21 KT=KT-199
22 CALL VEC(U1,COORD,IT,JT)
23 CALL VEC(U2,COORD,KT,JT)
24 COSA=U1(1)*U2(1)+U1(2)*U2(2)+U1(3)*U2(3)
25 COSA=ACOS(COSA)*180.00/PI
26 CALL ON(128)
27 CALL NMBR(130,COSA,13,'(F11.2)')
28 CALL OFF(122)
29 CALL ON(110)
30 CALL ON(120)
31 IHIT=0
32 GO TO 32
33 35 CALL OFF(120)
34 CALL OFF(118)
35 GO TO 4
```

C
C SCREENS THE DIHEDRAL ANGLE BETWEEN TWO PLANES.
C

```
39 40 CALL OFF(111)
40 DO 41 I=113,115
41 41 CALL OFF(I)
C NEW MENU
42 CALL ON(125)
43 CALL ON(119)
44 CALL ON(120)
C WAIT USERS DECISION!
45 IHIT=0
46 43 CALL LPEN(IH,IT)
47 IF(IH.EQ.0) GO TO 43
48 IHIT=IHIT+IH
49 IF(IHIT.LE.6) GO TO 43
50 CALL OFF(128)
51 IF(IT.EQ.110) GO TO 66
52 IF(IT.LT.200.OR.IT.GT.249) GO TO 43
53 CALL OFF(110)
54 IT=IT-199
55 CALL OFF(120)
56 CALL ON(121)
```

C READ SECOND ATOM.

```
61 IHIT=0
62 44 CALL LPEN(IH,JT)
63 IF(IH.EQ.0) GO TO 44
64 IHIT=IHIT+IH
65 IF(IHIT.LE.6) GO TO 44
66 IF(JT.LT.200.OR.JT.GT.249) GO TO 44
67 JT=JT-199
68 CALL OFF(121)
69 CALL ON(122)
```

C READ THIRD ATOM.


```

73      IHIT=0
74      45 CALL LPEN(IH,KT)
75      IF(IH.EQ.0) GO TO 45
76      IHIT=IHIT+IH
77      IF(IHIT.LE.6) GO TO 45
78      IF(KT.LT.200.OR.KT.GT.249) GO TO 45
79      KT=KT-199
80      CALL OFF(122)
81      CALL OFF(125)
82      CALL ON(126)
83      CALL ON(124)
84
85      C      READ OPTION.
86      CALL MENU(950.,670.,30.,131,'YES','NO')
87      IHIT=0
88
89      46 CALL LPEN(IH,JH)
90      IF(IH.EQ.0) GO TO 46
91      IHIT=IHIT+IH
92      IF(IHIT.LE.3) GO TO 46
93      JH=JH-130
94      GO TO (50,60) JH
95      GO TO 46
96
97      C      OPTION YES.
98      50 CALL ERAS(131)
99      CALL ERAS(132)
100     CALL OFF (124)
101     CALL ON(123)
102     IHIT=0
103
104     51 CALL LPEN(IH,LT)
105     IF(IH.EQ.0) GO TO 51
106     IHIT=IHIT+IH
107     IF(IHIT.LE.6) GO TO 51
108     IF(LT.LT.200.OR.LT.GT.249) GO TO 51
109     LT=LT-199
110     CALL VEC(U1,COORD,JT,IT)
111     CALL VEC(U2,COORD,KT,JT)
112     CALL VPROD(VP,U1,U2)
113     R=DSORT(1.000=(U1(1)*U2(1)+U1(2)*U2(2)+U1(3)*U2(3))*2)
114     DO 52 I=1,3
115     52 U3(I)=VP(I)/R
116     CALL VEC(U1,COORD,KT,JT)
117     CALL VEC(U2,COORD,LT,KT)
118     CALL VPROD(VP,U1,U2)
119     R=DSORT(1.000=(U1(1)*U2(1)+U1(2)*U2(2)+U1(3)*U2(3))*2)
120     DO 53 I=1,3
121     53 U2(I)=VP(I)/R
122     COSA=U3(1)*U2(1)+U3(2)*U2(2)+U3(3)*U2(3)
123     COSA=ARCCOS(COSA)*180.00/PI
124     CALL ON(128)
125     CALL NMBR(130,COSA,13,'(F11.6)')
126     CALL ON(110)
127     CALL OFF(123)
128     CALL OFF(126)
129     CALL ON(125)
130     CALL ON(120)

```



```

33      IHIT=0
34      GO TO 43
35      C          OPTION NO.
36      60 CALL ERAS(132)
37      CALL ERAS(131)
38      CALL OFF(124)
39      CALL ON(120)
40      IHIT=0
41      61 CALL LPEN(IH,LT)
42      IF(IH.EQ.0) GO TO 61
43      IHIT=IHIT+IH
44      IF(IHIT.LE.6) GO TO 61
45      IF(LT.LT.200.OR.LT.GT.249) GO TO 61
46      LT=LT-199
47      CALL OFF(120)
48      CALL ON(121)
49      IHIT=0
50      62 CALL LPEN(IH,MT)
51      IF(IH.EQ.0) GO TO 62
52      IHIT=IHIT+IH
53      IF(IHIT.LE.6) GO TO 62
54      IF(MT.LT.200.OR.MT.GT.249) GO TO 62
55      MT=MT-199
56      CALL OFF(121)
57      CALL ON(122)
58      IHIT=0
59      63 CALL LPEN(IH,NT)
60      IF(IH.EQ.0) GO TO 63
61      IHIT=IHIT+IH
62      IF(IHIT.LE.6) GO TO 63
63      IF(NT.LT.200.OR.NT.GT.249) GO TO 63
64      NT=NT-199
65      CALL VEC(U1,COORD,JT,IT)
66      CALL VEC(U2,COORD,KT,JT)
67      CALL VPROD(VP,U1,U2)
68      R=DSQRT(1.000-(U1(1)*U2(1)+U1(2)*U2(2)+U1(3)*U2(3))**2)
69      DO 64 I=1,3
70      64 U3(I)=VP(I)/R
71      CALL VEC(U1,COORD,MT,LT)
72      CALL VEC(U2,COORD,NT,MT)
73      CALL VPROD(VP,U1,U2)
74      R=DSQRT(1.000-(U1(1)*U2(1)+U1(2)*U2(2)+U1(3)*U2(3))**2)
75      DO 65 I=1,3
76      65 U2(I)=VP(I)/R
77      COSA=U3(1)*U2(1)+U3(2)*U2(2)+U3(3)*U2(3)
78      COSA=ARCOS(COSA)*180.00/PI
79      CALL ON(128)
80      CALL NMBR(130,COSA,13,(F11.6)^2)
81      CALL OFF(122)
82      CALL OFF(126)
83      CALL ON(110)
84      CALL ON(125)
85      CALL ON(120)
86      IHIT=0

```


RTRAN IV VOIC=03C
RE=08K, UIC=[11,15]

SUN 14-MAY-78 16:43:26

PAGE 008

DK1:,GEVEN/LI:1/NOSP=DK1:GEVEN.

```
05      GO TO 43
06      66 CALL OFF(125)
07      CALL OFF(119)
08      CALL OFF(120)
09      GO TO 4
C      PLANE <<<<<<<
10      100 DD 101 I=110,130
11      101 CALL ERAS(I)
12      CALL CMPSR
13      RETURN
14      END
```



```

01      SUBROUTINE HELICE
02      C
03      C          THIS SUBROUTINE COMPUTES THE COORDINATES OF
04      C          *** DIATOMIC *** CHAINS.
05      C
06      IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
07      REAL*4 SCALX0,SCALY0,SCALX1,SCALY1
08      COMMON/COORD/COORD(50,3),NAT,SCALX0,SCALY0,SCALX1,SCALY1,IATOMS
09      COMMON/ZMAT/INMAT(50),IZ(50,3),BOND1(50),ALPHA(50),BETA(50)
10      DIMENSION U1(3),U2(3),U3(3),VP(3),DD(3)
11      DATA IN0/'N '/
12      DATA PI/3.141592653589793D0/
13      C
14      CALL OFF(1)
15      DO 1 I=3,21
16      1 CALL OFF(I)
17      CALL OFF(23)
18      C
19      IRD=4
20      IWR=4
21      WRITE(IWR,30)
22      30 FORMAT(1H,'DO YOU WANT TO COMPUTE THE COORDINATES OF A HELICAL MO
23      ILECULE ?','/,X, '(Y=YES, N=NO)')
24      READ(IRD,31) IYES
25      31 FORMAT(A2)
26      IF(IYES.EQ.IN0) GO TO 64
27      C          CHOICE BETWEEN LEFTHANDED AND RIGHTHANDED CHAINS.
28      LEVROG=0
29      WRITE(IWR,29)
30      29 FORMAT(1H,'LEFTHAND ? (Y=YES, N=RIGHTHAND)')
31      READ(IWR,28) IYES
32      28 FORMAT(A2)
33      IF(IYES.NE.IN0) GO TO 27
34      LEVROG=1
35      27 CONTINUE
36      C          2 DUMMY ATOMS FIXING THE AXES.
37      NAT=2
38      C          READ DATAS FOR THE FIRST ATOM OF THE HELIX.
39      C          BL12 : DISTANCE BETWEEN ATOM1 AND ATOM2.
40      C          A1 : BOND ANGLE : AT2-AT1-AT2.
41      C          B12 : DIHEDRAL ANGLE : AT2-AT1-AT2-AT1.
42      NAT=NAT+1
43      WRITE(IWR,32)
44      32 FORMAT(1H,'INTRODUCE THE FOLLOWING DATAS FOR THE FIRST ATOM OF
45      1THE CHAIN :','/,X, 'ATOMIC NUMBER,BOND LENGTH C1C2,ANGLE C2C1C2,+/-
46      2DIHEDRAL ANGLE C2C1C2C1')
47      READ(IRD,33) INMAT(3),BL12,A1,B12
48      33 FORMAT(I3,F11.8,F13.8,F13.8)
49      C          READ DATAS FOR THE SECOND ATOM OF THE HELIX.
50      NAT=NAT+1
51      WRITE(IWR,34)
52      34 FORMAT(1H,'INTRODUCE THE FOLLOWING DATAS FOR THE SECOND ATOM OF
53      1THE CHAIN :','/,X, 'ATOMIC NUMBER,BOND LENGTH C2C1,ANGLE C1C2C1,+/-
54      2DIHEDRAL ANGLE C1C2C1C2')

```



```

39 READ(IRD,35) INMAT(4),BL21,A2,B21
40 35 FORMAT(I3,F11.8,F13.8,F13.8)
C READ DATAS FOR THE ATOMS FIXED ON THE HELIX (ZMAT).
41 NAT=NAT+2
42 WRITE(IWR,36)
43 36 FORMAT(1H,'AN OTHER ATOM OF THE UNIT CELL? (Y=YES, N=NO)')
44 READ(IRD,37) IYES
45 37 FORMAT(A2)
46 IF(IYES.EQ.1NO) GO TO 45
48 38 NAT=NAT+1
49 WRITE(IWR,39) NAT
50 39 FORMAT(1H,'INTRODUCE THE FOLLOWING DATAS FOR ATOM ',I2,' : ',/,X,
1'ATOMIC NUMBER, ATOM J, BOND LENGTH, ATOM K, ANGLE, ATOM L, +/'
2DIHEDRAL ',/,1H,'63X,'ANGLE')
51 READ(IRD,40) INMAT(NAT),IZ(NAT,1),BONDL(NAT),IZ(NAT,2),ALPHA(NAT),
1IZ(NAT,3),BETA(NAT)
52 40 FORMAT(I3,I4,F11.8,I4,F13.8,I4,F13.8)
53 WRITE(IWR,41)
54 41 FORMAT(1H,'AN OTHER ATOM OF THE UNIT CELL ?')
55 READ(IRD,42) IYES
56 42 FORMAT(A2)
57 IF(IYES.NE.1NO) GO TO 38
59 GO TO 50
60 45 CONTINUE
C ZMAT: 2 DUMMY ATOMS FIXING THE AXES.
61 50 INMAT(1)=0
62 INMAT(2)=0
63 DO 51 I=1,3
64 DO 51 J=1,3
65 51 IZ(I,J)=0
66 BONDL(1)=0.000
67 ALPHA(1)=0.000
68 BETA(1)=0.000
69 IZ(2,1)=1
70 BONDL(2)=1.000
71 ALPHA(2)=0.000
72 BETA(2)=0.000
73 ALPHA(3)=90.000
C COMPUTATION OF CYLINDRICAL PARAMETERS.(SHIMANOUCI)
C R1 : RADIUS OF ATOM1.
C R2 : RADIUS OF ATOM2.
C D12 : PROJECTION OF BL12 ON THE Z-AXE.
C D21 : PROJECTION OF BL21 ON THE Z-AXE.
C TETA12 : ANGLE OF ROTATION ROUND THE Z-AXE FROM ATOM1 TO
C TETA21 : ANGLE OF ROTATION ROUND THE Z-AXE FROM ATOM2 TO
C TETA : TETA12 + TETA21.
74 TORAD=PI/180.000
75 A1=A1*TORAD/2.00
76 A1S=DSIN(A1)
77 A1C=DCOS(A1)
78 A2=A2*TORAD/2.00
79 A2S=DSIN(A2)
80 A2C=DCOS(A2)
81 B12=B12*TORAD/2.00

```



```

02      B21=B21*TORAD/2.00
03      SB=B12+B21
04      DB=B12-B21
05      TETA=DCOS(SB)*A1S*A2S=DCOS(DB)*A1C*A2C
06      TETA=ARCOS(TETA)
07      D12=(DSIN(SB)*A1S*A2S=DSIN(DB)*A1C*A2C)*BL12/DSIN(TETA)
08      D21=(DSIN(SB)*A1S*A2S+DSIN(DB)*A1C*A2C)*BL21/DSIN(TETA)
09      D=D12+D21
10      TETA=TETA*2.00
11      A1=A1*2.00
12      A2=A2*2.00
13      R0=1.00=DCOS(TETA)
14      R1=0.500*(BL12*BL12-2.00*BL12*BL21+DCOS(A2)+BL21*BL21-D*D)/R0
15      R1=DSQRT(R1)
16      R2=0.500*(BL12*BL12-2.00*BL12*BL21+DCOS(A1)+BL21*BL21-D*D)/R0
17      R2=DSQRT(R2)
18      TETA12=(R1*R1+R2*R2+D12*D12-BL12*BL12)/(2*R1*R2)
19      TETA12=ARCOS(TETA12)
20      TETA21=(R1*R1+R2*R2+D21*D21-BL21*BL21)/(2*R1*R2)
21      TETA21=ARCOS(TETA21)

```

C PRINT CYLINDRICAL PARAMETERS.

```

02      LP=2
03      WRITE(LP,55) D12
04      55 FORMAT(1H1,'D12 =',D23.16)
05      WRITE(LP,56) D21
06      56 FORMAT(1H , 'D21 =',D23.16)
07      WRITE(LP,57) D
08      57 FORMAT(1H , 'D =',D23.16)
09      WRITE(LP,58) R1
10      58 FORMAT(1H , 'R1 =',D23.16)
11      WRITE(LP,59) R2
12      59 FORMAT(1H , 'R2 =',D23.16)
13      TE=TETA/TORAD
14      IF(LEVROG.EQ.0) TE=360.000=TE
15      WRITE(LP,60) TE
16      60 FORMAT(1H , 'TETA =',D23.16)
17      TE12=TETA12/TORAD
18      WRITE(LP,61) TE12
19      61 FORMAT(1H , 'TETA12 =',D23.16)
20      TE21=TETA21/TORAD
21      WRITE(LP,62) TE21
22      62 FORMAT(1H , 'TETA21 =',D23.16)
23      SK=360.00/TE
24      WRITE(LP,63) SK
25      63 FORMAT(1H , F10.5, ' MONOMERES/SPIRE')

```

C ZMAT: PARAMETERS OF THE FIRST ATOM OF THE CHAIN.

```

07      IZ(3,1)=1
08      BOND(3)=R1
09      IZ(3,2)=2
10      ALPHA(3)=90.00
11      BETA(3)=0.00

```

C ZMAT: PARAMETERS OF THE SECOND ATOM OF THE CHAIN.

```

02      IZ(4,1)=3
03      BOND(4)=BL12

```



```

24      IZ(4,2)=1
25      ALP=(R1-R2*DCOS(TETA12))/BL12
26      ALPHA(4)=ARCOS(ALP)/TORAD
27      IZ(4,3)=2
28      BET=(R2*DSIN(TETA12))/D12
29      BETA(4)=-DATAN(BET)/TORAD
30      IF(LEVROG.EQ.0) BETA(4)=-BETA(4)
C          IN ORDER TO FACILITATE THE FIXATION, BY THE USER, OF ATOMS
C          ON THE HELIX, THE PROGRAM BUILDS TWO DUMMY ATOMS WHO ARE :
C          ZMAT: PARAMETERS OF THE FIRST ATOM OF THE NEXT UNIT CELL.
32      INMAT(5)=0
33      IZ(5,1)=4
34      BOND1(5)=BL21
35      IZ(5,2)=3
36      ALPHA(5)=A2/TORAD
37      IZ(5,3)=2
C
38      COORD(1,1)=0.00
39      COORD(1,2)=0.00
40      COORD(1,3)=1.00
41      COORD(2,1)=R1
42      COORD(2,2)=0.00
43      COORD(2,3)=0.00
44      COORD(3,1)=R2*DCOS(TETA12)
45      COORD(3,2)=R2*DSIN(TETA12)
46      IF(LEVROG.EQ.0) COORD(3,2) = -COORD(3,2)
47      COORD(3,3)=D12
48      COORD(4,1)=R1*DCOS(TETA)
49      COORD(4,2)=R1*DSIN(TETA)
50      COORD(4,3)=0
C
52      CALL VEC(U1,COORD,3,4)
53      CALL VEC(U2,COORD,2,3)
54      CALL VPROD(VP,U1,U2)
55      R=DSORT(1.00-(U1(1)*U2(1)+U1(2)*U2(2)+U1(3)*U2(3))*2)
56      DO 65 I=1,3
57      65 U3(I)=VP(I)/R
58      CALL VEC(U1,COORD,2,3)
59      CALL VEC(U2,COORD,1,2)
60      CALL VPROD(VP,U1,U2)
61      R=DSORT(1.00-(U1(1)*U2(1)+U1(2)*U2(2)+U1(3)*U2(3))*2)
62      DO 66 I=1,3
63      66 U2(I)=VP(I)/R
64      COSA=U3(1)*U2(1)+U3(2)*U2(2)+U3(3)*U2(3)
65      BETA(5)=ARCOS(COSA)/TORAD
66      CALL VEC(DD,COORD,4,3)
67      TEST=U2(1)*DD(1)+U2(2)*DD(2)+U2(3)*DD(3)
68      IF(TEST.GT.0.000) BETA(5)=-BETA(5)
C          ZMAT: PARAMETERS OF THE SECOND ATOM OF THE NEXT UNIT CELL.
70      INMAT(6)=0
71      IZ(6,1)=5
72      BOND1(6)=BL12
73      IZ(6,2)=4
74      ALPHA(6)=A1/TORAD

```


12(6,3)=3
 BETA(6)=821*2.00/TORAD

CALL K00RD

CALL BEELD

ROTATION = TRANSLATION OF THE UNIT CELL;

64 WRITE(IWR,67)
 67 FORMAT(IH,'DO YOU WANT THE COORDINATES OF OTHER UNIT CELLS?')
 68 READ(IRD,68) IYES
 68 FORMAT(A2)
 69 IF(IYES.EQ.ING) GO TO 100
 69 WRITE(IWR,70)
 70 FORMAT(IH,'HOW MUCH ROTATION-TRANSLATION DO YOU WANT?')
 71 READ(IRD,71) NROT
 71 FORMAT(I3)

MAT=0

DO 72 I=1,NAT

IF(INMAT(I).EQ.0) GO TO 72

MAT=MAT+1

72 CONTINUE

KTEST=NAT+(MAT*NROT)

IATOMS=MAT*(NROT+1)

IF(KTEST.LE.50) GO TO 75

WRITE(IWR,73)

73 FORMAT(IH,'IMPOSSIBLE : THERE SHOULD BE MORE THAN 50 ATOMS?')

GO TO 69

75 K=NAT

TE=0.00

DO 80 J=1,NROT

TE=TE+ETA

SSIN=DSIN(TE)

CCOS=CCOS(TE)

DO 80 I=1,NAT

IF(INMAT(I).EQ.0) GO TO 80

K=K+1

INMAT(K)=INMAT(I)

ROTATION.

COORD(K,1)=COORD(I,1)*CCOS-COORD(I,2)*SSIN

COORD(K,2)=COORD(I,2)*CCOS+COORD(I,1)*SSIN

TRANSLATION.

COORD(K,3)=COORD(I,3)+D*XJ

80 CONTINUE

NAT=K

CALL BEELD

100 RETURN

END


```

11 SUBROUTINE INPUT
12 REAL*8 COORD,BONDL,ALPHA,BETA
13 COMMON/OFIL/IBUF(4000)
14 COMMON/COORD/COORD(50,3),NAT,SCALX0,SCALY0,SCALX1,SCALY1,IATOMS
15 COMMON/ZMAT/INMAT(50),IZ(50,3),BONDL(50),ALPHA(50),BETA(50)
16 COMMON/PARAM/IXYZ,IDUMAT,IXES,ITEST,IBOND,ISCRAT
17 COMMON/BOND/MBOUND(8,50)
18 COMMON/TITEL/LABEL(20)
19 DATA INO/'N'/
C
C THIS SUBROUTINE READS THE DATAS.
C
C CALL SCAL(0.,0.,1023.,1023.)
C TURN OFF THE MAIN MENU.
1 DO 1 I=1,9
2 1 CALL OFF(I)
3 DO 2 I=11,19
4 2 CALL OFF(I)
5 CALL OFF(21)
6 CALL OFF(22)
7 CALL OFF(23)
C NEW MENU
8 CALL SUBP(24)
9 CALL STAT(-1)
10 CALL APNT(910.,400.,0,-8)
11 CALL TEXT('CARDS')
12 CALL APNT(910.,540.,0,-8)
13 CALL TEXT('TERMIN')
14 CALL STAT(1)
15 CALL ESUB
16 CALL MENU(910.,260.,40.,29,'RETURN')
17 CALL MENU(910.,320.,40.,25,'ZMAT',,'COORDIN')
18 CALL MENU(910.,460.,40.,27,'ZMAT',,'COORDIN')
19 CALL MENU(910.,200.,30.,30,'CARDS DO')
C WAIT USERS DECISION.
30 3 CALL LPEN(IH,IT)
31 IF(IH.EQ.0) GO TO 3
32 IT=IT-24
33 LTEST=0
34 GO TO (4,30,60,99,150,400) IT
35 GO TO 3
36 400 LTEST=1
C
C CARDS = ZMAT
C NAT = NUMBER OF ATOMS.
C
38 4 IWR=3
39 IF(NAT.NE.0) GO TO 404
40 READ(IWR,5) LABEL
41 5 FORMAT(40A2)
42 READ(IWR,403) INMAT(1)
43 403 FORMAT(I3)
44 NAT=1
45 404 NAT=NAT+1

```



```

17 I=NAT
18 6 IF(LTEST.EQ.1) GO TO 7
19 READ(IWR,8,END=9)INMAT(I),IZ(I,1),BONDL(I),IZ(I,2),ALPHA(I),IZ(I,3),
20 1),BETA(I)
21 8 FORMAT(I3,I4,G7.4,I4,G11.4,I4,G11.4)
22 GO TO 405
23 7 READ(IWR,401)INMAT(I),IZ(I,1),BONDL(I),IZ(I,2),ALPHA(I),IZ(I,3),
24 1BETA(I)
25 401 FORMAT(I3,I3,F11.8,I3,F13.8,I3,F13.8)
26 405 IF(INMAT(I).EQ.0) GO TO 402
27 IATOMS=IATOMS+1
28 402 IF(NAT.EQ.50) GO TO 10
29 GO TO 404
30 9 NAT=NAT+1
31 GO TO 12
32 C ERROR MESSAGE.
33 10 IWR=4
34 WRITE(IWR,11)
35 11 FORMAT(1H,'THIS PROGRAM IS DIMENSIONED FOR MOLECULES CONTAINING'
36 1,/, ' LESS THAN 50 ATOMS.')
```

```

37 C
38 12 DO 13 I=1,3
39 DO 13 J=I,3
40 13 IZ(I,J)=0
41 BONDL(1)=0.000
42 ALPHA(1)=0.000
43 ALPHA(2)=0.000
44 BETA(1)=0.000
45 BETA(2)=0.000
46 BETA(3)=0.000
47 C CALCULATE THE COORDINATES
48 CALL KOORD
49 C SCREEN THE MOLECULE
50 CALL XYZPL
51 IWR=4
52 IRD=4
53 14 WRITE(IWR,15)
54 15 FORMAT(1H,'WOULD YOU LIKE TO INDICATE A BOND ? (Y=YES, N=NO)')
55 READ(IRD,16) IYES
56 16 FORMAT(A1)
57 IF(IYES.EQ.INQ) GO TO 150
58 WRITE(IWR,17)
59 17 FORMAT(1H,'BETWEEN ATOM (I2) AND ATOM (J2) :')
60 READ(IRD,18) IATOM,JATOM
61 18 FORMAT(2I2)
62 IF(IATOM.NE.JATOM) GO TO 20
63 WRITE(IWR,19)
64 19 FORMAT(1H,'THAT STANDS TO REASON')
65 GO TO 14
66 20 I=1
67 21 IF(MBOUND(I,IATOM).EQ.JATOM) GO TO 14
68 IF(MBOUND(I,IATOM).NE.0) GO TO 22
69 MBOUND(I,IATOM)=JATOM
70 GO TO 24
```



```
DK1:INPUT/II:1/NOSP=DK1:INPUT.
```

```

1      22 I=I+1
2      IF(I.LE.8) GO TO 21
4      WRITE(IWR,23)
5      23 FORMAT(1H,'ONLY 8 BONDS PER ATOM ARE PERMITTED')
6      GO TO 14
7      24 I=1
8      25 IF(MBOUND(I,JATOM).NE.0) GO TO 26
9      MBOUND(I,JATOM)=IATOM
1     GO TO 27
2     26 I=I+1
3     GO TO 25
4     27 IF(IBOND.EQ.0) GO TO 28
6     CALL ERAS(34)
7     CALL CMPRS
8     CALL BOND
9     28 GO TO 14

```

C CARDS - COORDIN

10 30 60 10 3

TERMIN = ZMAT

```

01 IWR=4
02 IRD=4
03 WRITE(IWR,61) NAT
04 61 FORMAT(1H, 'THE NUMBER OF ATOMS IS ',I3)
05 62 WRITE(IWR,63)
06 63 FORMAT(1H, 'AN OTHER ATOM ? (Y=YES, N=NO)')
07 READ(IRD,64) IYES
08 64 FORMAT(A2)
09 IF(IYES.EQ.1) GO TO 150
10 NAT=NAT+1
11 65 IF(NAT=1) 66,66,70
12 66 WRITE(IWR,67)
13 67 FORMAT(1H, 'INTRODUCE THE ATOMIC NUMBER OF ATOM 1')
14 READ(IRD,68) INMAT(1)
15 68 FORMAT(I3)
16 IF(INMAT(1).EQ.0) GO TO 69
17 IATOMS=1
18 69 IZ(1,1)=0
19 IZ(1,2)=0
20 IZ(1,3)=0
21 BOND1(1)=0.000
22 ALPHA(1)=0.000
23 BETA(1)=0.000
24 GO TO 62
25 70 IF(NAT=2) 65,71,75
26 71 WRITE(IWR,72)
27 72 FORMAT(1H, 'INTRODUCE THE FOLLOWING DATAS FOR ATOM 1'
28 'ATOMIC NUMBER,ATOM,BOND LENGTH')
29 READ(IRD,73) INMAT(2),IZ(2,1),BOND1(2)
30 73 FORMAT(I3,I4,F11.8)
31 IF(INMAT(2).EQ.0) GO TO 74

```



```

4 IATOMS=IATOMS+1
5 74 IZ(2,2)=0
6 IZ(2,3)=0
7 ALPHA(2)=0.000
8 BETA(2)=0.000
9 GO TO 83
0 75 IF(NAT=3) 65,76,80
1 76 WRITE(IWR,77)
2 77 FORMAT(1H, 'INTRODUCE THE FOLLOWING DATAS FOR ATOM 3 :',/,X,
3 1, 'ATOMIC NUMBER, ATOM J, BOND LENGTH, ATOM K, ANGLE')
4 READ(IRD,78) INMAT(3), IZ(3,1), BONDL(3), IZ(3,2), ALPHA(3)
5 78 FORMAT(I3, I4, F11.8, I4, F13.8)
6 IF(INMAT(3).EQ.0) GO TO 79
7 IATOMS=IATOMS+1
8 79 IZ(3,3)=0
9 BETA(3)=0.000
0 GO TO 83
1 80 WRITE(IWR,81) NAT
2 81 FORMAT(1H, 'INTRODUCE THE FOLLOWING DATAS FOR ATOM I = ', I3, X,
3 1, 'J = ',/,X, 'ATOMIC NUMBER, ATOM J, BOND LENGTH, ATOM K, ANGLE, ATOM L
4 2, +/- DIHEDRAL',/,1H, '63X, 'ANGLE')
5 READ(IRD,82) INMAT(NAT), IZ(NAT,1), BONDL(NAT), IZ(NAT,2), ALPHA(NAT),
6 IZ(NAT,3), BETA(NAT)
7 82 FORMAT(I3, I4, F11.8, I4, F13.8, I4, F13.8)
8 IF(INMAT(NAT).EQ.0) GO TO 83
9 IATOMS=IATOMS+1
0 83 CALL KOORD
1 CALL XYZPL
2 IJUMAT=1
3 CALL DUMAT
4 IF(IAxes.EQ.0) GO TO 84
5 CALL AXES
6 84 WRITE(IWR,85)
7 85 FORMAT(1H, 'WOULD YOU LIKE TO INDICATE A BOND ? (Y=YES, N=NO)')
8 READ(IRD,86) IYES
9 86 FORMAT(A1)
0 IF(IYES.EQ.IND) GO TO 62
1 WRITE(IWR,87)
2 87 FORMAT(1H, 'BETWEEN ATOM (I2) AND ATOM (I2) :')
3 READ(IRD,88) IATOM, JATOM
4 88 FORMAT(2I2)
5 IF(IATOM.NE.JATOM) GO TO 90
6 WRITE(IWR,89)
7 89 FORMAT(1H, 'THAT STANDS TO REASON')
8 GO TO 84
9 90 I=1
0 91 IF(MBOUND(I, IATOM).EQ.JATOM) GO TO 84
1 IF(MBOUND(I, IATOM).NE.0) GO TO 92
2 MBOUND(I, IATOM)=JATOM
3 GO TO 94
4 92 I=I+1
5 IF(I.LE.8) GO TO 91
6 WRITE(IWR,93)
7 93 FORMAT(1H, 'ONLY 8 BONDS PER ATOM ARE PERMITTED')

```


TRAN IV V01C=03C
E=00K, UIC={11,151}

SUN 14-MAY-78 16:45:12

PAGE 005

DK1: INPUT/LI:1/NDSP=DK1:INPUT.

```
2      GO TO 62
3      94 I=1
4      95 IF(MBOUND(I,JATOM).NE.0) GO TO 96
6      MBOUND(I,JATOM)=IATOM
7      GO TO 97
8      96 I=I+1
9      GO TO 95
10     97 IF(IBOND.EQ.0) GO TO 98
12     CALL BOND
13     98 GO TO 84
```

```
C
C      TERMIN = COORDIN
C
```

```
14     99 GO TO 3
C
```

```
15     150 DO 151 I=24,30
16     151 CALL ERAS(I)
17     CALL CMPRS
18     RETURN
19     END
```



```

01      SUBROUTINE K0ORD
02      C
03      C      THIS SUBROUTINE COMPUTES THE COORDINATES OF THE MOLECULE.
04      C
05      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
06      REAL*4 SCALX0,SCALY0,SCALX1,SCALY1
07      COMMON/COOR/COORD(50,3),NAT,SCALX0,SCALY0,SCALX1,SCALY1,IATOMS
08      COMMON/ZMAT/INMAT(50),IZ(50,3),BONDL(50),ALPHA(50),BETA(50)
09      DIMENSION THBCD(50),PHABCD(50),U1(3),U2(3),U3(3),U4(3),VP(3)
10      DIMENSION VJ(3),V3(3),A(50),B(50),D(50)
11      DATA PI/3.14159265358979300/
12      DATA TENMS/1.0D-10/
13      C
14      C      TEMPORARY COORDINATES OF THE 3 FIRST ATOMS
15      DO 10 I=1,3
16      DO 10 J=1,3
17      10 COORD(I,J)=0.000
18      C
19      C      TRANSFORM DEGREES TO RADIANS
20      TORAD=PI/180.00
21      DO 20 I=1,NAT
22      THBCD(I)=ALPHA(I)*TORAD
23      20 PHABCD(I)=BETA(I)*TORAD
24      IF(NAT=2) 260,25,25
25      C
26      C      COORDINATES OF THE SECOND ATOM
27      25 COORD(2,3)=BONDL(2)
28      IF(NAT=3)260,30,30
29      C
30      C      COORDINATES OF THE 3 TH ATOM
31      30 COORD(3,1)=BONDL(3)*DSIN(THBCD(3))
32      IF(IZ(3,1)=1) 50,40,50
33      40 COORD(3,3)=BONDL(3)*DCOS(THBCD(3))
34      GO TO 60
35      50 COORD(3,3)=COORD(2,3)+BONDL(3)*DCOS(THBCD(3))
36      IF(NAT=4) 260,60,60
37      C
38      C      COORDINATES OF THE NEXT ATOMS IF THE ATOM WITH IT
39      C      IT MAKES A BOND IS ON THE Z-AXIS
40      60 DO 80 I=4,NAT
41      IF(DABS(COORD(I=1,1))-TENMS)70,90,90
42      70 COORD(I,1)=BONDL(I)*DSIN(THBCD(I))
43      COORD(I,2)=0.000
44      ITEMP=IZ(I,1)
45      JTEMP=IZ(I,2)
46      80 COORD(I,3)=COORD(ITEMP,3)+BONDL(I)*DCOS(THBCD(I))*DSIGN(1.000,
47      1COORD(ITEMP,3)-COORD(JTEMP,3))
48      90 K=I
49      C
50      C      COORDINATES OF THE NEXT ATOMS OTHERWISE
51      IF(K=NAT)100,100,260
52      100 DO 250 J=K,NAT
53      DCAJ=DCOS(THBCD(J))
54      DSAJ=DSIN(THBCD(J))
55      DCBJ=DCOS(PHABCD(J))
56      DSBJ=DSIN(PHABCD(J))
57      CALL VEC(U1,COORD,IZ(J,2),IZ(J,3))
58      CALL VEC(U2,COORD,IZ(J,1),IZ(J,2))
59      CALL VPROD(VP,U1,U2)
60      R=DSQRT(1.000-((U1(1)*U2(1)+U1(2)*U2(2)+U1(3)*U2(3))*2)

```


TRAN IV V01C=03C
PE=0RK, UIC=[11,15]

SUN 14-MAY-78 16:45:56

PAGE 002

DK1:,KOORD/LI:1/NOSP=DK1:KOORD.

```
14      DO 120 I=1,3
15      120 U3(I)=VP(I)/R
16      CALL VPROD(U4,U3,U2)
17      DO 130 I=1,3
18      VJ(I)=BONDL(J)*(-U2(I)*DCAJ+U4(I)*DSAJ*DCBJ+U3(I)*DSAJ*DSBJ)
19      ITEMP=IZ(J,1)
20      130 COORD(J,I)=VJ(I)+COORD(ITEMP,I)
21      250 CONTINUE
22      C
23      260 RETURN
24      END
```



```
01      SUBROUTINE NEANT
02      COMMON/DFILE/IRUF(4000)
03      C
04      CALL SCAL(0.,0.,1023.,1023.)
05      DO 20 I=1,23
06      20 CALL OFF(I)
07      C
08      CALL SUBP(100)
09      CALL APNT(10.,500.,-1,-8)
10      CALL TEXT('SORRY BUT THIS OPTION IS NOT REALIZED')
11      CALL ESUB
12      CALL MENU(010.,700.,20.,101,'RETURN')
13      1 CALL LPEN(IH,IT)
14      IF(IH.EQ.0)GO TO 1
15      IT=IT-100
16      GO TO (2) IT
17      GO TO 1
18      C
19      2 CALL ERAS(100)
20      CALL ERAS(101)
21      CALL CMPS
22      RETURN
23      END
```



```

01 SUBROUTINE OUTPUT
02 REAL*8 COORD,BONDL,ALPHA,BETA,DIST,R
03 COMMON/DFILE/IRUF(4000)
04 COMMON/COORD/COORD(50,3),NAT,SCALX0,SCALY0,SCALX1,SCALY1,IATOMS
05 COMMON/ZMAT/INMAT(50),IZ(50,3),BONDL(50),ALPHA(50),BETA(50)
06 COMMON/PARAM/IXYZ,IDUMAT,IXES,ITEST,IBOND,ISCRAT
07 COMMON/TITEL/LABEL(20)
08 DIMENSION DIST(50),KAT(50)
09 DATA INO/'N'/'
10 IF(NAT.EQ.0) GO TO 150
11 C      TURN OFF MAIN MENU.
12 CALL SCAL(0.,0.,1023.,1023.)
13 DO 1 I=1,23
14 1 CALL OFF(I)
15 C      SIGNIFICANT NUMBERS OF THE COORDINATES.
16 IWR=4
17 IRD=4
18 WRITE(IWR,200)
19 200 FORMAT(1H,'DO YOU WANT TO MAINTAIN ALL THE SIGNIFICANT NUMBERS OF
20 1 THE COORDINATES ',/,1H,'?' (Y,N)')
21 READ(IRD,201) IYES
22 201 FORMAT(A1)
23 IF(IYES.NE.INO) GO TO 204
24 WRITE(IWR,202)
25 202 FORMAT(1H,'HOW MUCH SIGNIFICANT NUMBERS DO YOU WANT ?')
26 READ(IRD,203) NCS
27 203 FORMAT(I2)
28 IF(NCS.GT.15) GO TO 204
29 CALL ZERO(NCS)
30 204 CONTINUE
31 C      PRINT
32 IWR=2
33 IT=4
34 WRITE(IWR,4)
35 4 FORMAT(1H1,28X,'FACULTES UNIVERSITAIRES',/,1H,33X,'N.D.DE LA PAIX
36 1',/,1H,17X,'RUE DE BRUXELLES 61 B-5000 NAMUR (BELGIQUE)',/,1H,
37 230X,'TEL. 081 / 22 90 61',/,1H,33X,'LABORATOIRE DE',/,1H,27X,
38 3'CHIMIE THEORIQUE APPLIQUEE',/,1H,39X,'*',/,1H,38X,'* ',/,1H,
39 421X,37(' '),/,1H,21X,'! COORDINATES GENERATING PROGRAM. !',/,
40 51H,21X,37(' '),/)
41 WRITE(IT,5)
42 5 FORMAT(1H,'A TITEL ? (Y=YES, N=NO)')
43 READ(IT,6) IYES
44 6 FORMAT(A2)
45 IF(IYES.EQ.INO) GO TO 8
46 READ(IT,7) LABEL
47 7 FORMAT(40A2)
48 8 CONTINUE
49 WRITE(IWR,9) LABEL
50 9 FORMAT(1H,'SYSTEM : ',40A2)
51 WRITE(IT,10)
52 10 FORMAT(1H,'DO YOU WANT TO PRINT COMMENTS ? (3 LINES) (Y=YES, N=
53 1NO)')
54 READ(IT,11) IYES

```



```

19 11 FORMAT(A2)
20 IF(IYES.EQ.IND) GO TO 15
21 WRITE(IWR,18)
22 18 FORMAT(/,1H,'COMMENTS :')
23 DO 13 I=1,3
24 READ(IT,12) LABEL
25 12 FORMAT(40A2)
26 13 WRITE(IWR,14) LABEL
27 14 FORMAT(1H,10X,40A2)
28 GO TO 17
29 15 WRITE(IWR,16)
30 16 FORMAT(/,1H,'COMMENTS : NO.')
31 C NEW MENU
32 17 CALL MENU(910.,140.,60.,80,'FOR006','RETURN')
33 CALL SUBP(91)
34 CALL APNT(910.,120.,0,-8)
35 CALL TEXT(' .DAT')
36 CALL ESUB
37 CALL MENU(910.,260.,40.,82,'FORMAT D','FORMAT F')
38 CALL SUBP(92)
39 CALL STAT(-1)
40 CALL APNT(910.,340.,0,-8)
41 CALL TEXT(' .DUMMY AT')
42 CALL STAT(1)
43 CALL ESUB
44 CALL MENU(910.,380.,40.,84,'FORMAT D','FORMAT F')
45 CALL SUBP(93)
46 CALL STAT(-1)
47 CALL APNT(910.,460.,0,-8)
48 CALL TEXT(' .ATOMS')
49 CALL APNT(910.,500.,0,-8)
50 CALL TEXT(' .DIST OF')
51 CALL STAT(1)
52 CALL ESUB
53 CALL MENU(910.,560.,40.,86,'FORMAT D','FORMAT F')
54 CALL SUBP(94)
55 CALL STAT(-1)
56 CALL APNT(910.,640.,0,-8)
57 CALL TEXT(' .DUMMY AT')
58 CALL STAT(1)
59 CALL ESUB
60 CALL MENU(910.,680.,40.,88,'FORMAT D','FORMAT F')
61 CALL SUBP(95)
62 CALL STAT(-1)
63 CALL APNT(910.,760.,0,-8)
64 CALL TEXT(' .ATOMS')
65 CALL APNT(910.,800.,0,-8)
66 CALL TEXT(' .COORD OF')
67 CALL STAT(1)
68 CALL ESUB
69 CALL MENU(910.,860.,40.,90,'ZMAT')
70 C WAIT USERS DECISION.
71 20 CALL LPEN(IH,IT)
72 IF(IH.EQ.0) GO TO 20

```



```

3      IF(ITEST.EQ.1) GO TO 21
5      ITEST=1
6      IT=IT+79
7      GO TO (30,100,38,39,50,51,65,66,80,81,90) IT
8  21  ITEST=0
9      GO TO 20

```

C FICHER FOR006.DAT

```

0  30  IR=6
1      CALL OFF(80)
2      WRITE(IR,31)IATOMS
3  31  FORMAT(I2)
4      DO 33 I=1,NAT
5      IF(INMAT(I).EQ.0) GO TO 33
6      WRITE(IR,32) COORD(I,1),COORD(I,2),COORD(I,3)
7  32  FORMAT(3D23.16)
8  33  CONTINUE
9      CALL ON(80)
10     GO TO 20

```

C

```

2  38  LTEST=1
3      GO TO 40
4  39  LTEST=0
5  40  WRITE(IWR,41)
6  41  FORMAT(/,1H , '      DISTANCES WITH DUMMY ATOMS :',/,1H ,7X,
7      128('-''))
8      DO 48 I=1,NAT
9      IF(INMAT(I).NE.0) GO TO 48
10     WRITE(IWR,42) I
11  42  FORMAT(/,1H , '      BETWEEN ATOM ',I2,' AND ATOMS :',/,7)
12     DO 44 J=1,NAT
13     DIST(J)=0.000
14     DO 43 K=1,3
15     R=COORD(I,K)-COORD(J,K)
16  43  DIST(J)=DIST(J)+R*R
17  44  DIST(J)=DSORT(DIST(J))
18     IF(LTEST.EQ.0) GO TO 46
19     WRITE(IWR,45)(J,DIST(J),J=1,NAT)
20  45  FORMAT(3('(',I2,',')',D22.15,X))
21     GO TO 48
22  46  WRITE(IWR,47)(J,DIST(J),J=1,NAT)
23  47  FORMAT(4(2X,'(',I2,',')',F12.8,2X))
24  48  CONTINUE
25     GO TO 20

```

C

```

7  50  LTEST=1
8      GO TO 52
9  51  LTEST=0
10  52  WRITE(IWR,53)
11  53  FORMAT(/,1H , '      DISTANCES :',/,1H ,7X,11('-''))
12     II=NAT-1
13     DO 60 I=1,II
14     IF(INMAT(I).EQ.0) GO TO 60
15     WRITE(IWR,54) I
16  54  FORMAT(1H ,/, '      BETWEEN ATOM ',I2,' AND ATOMS :',/,7)

```



```

58 JJ=I+1
59 IAT=0
60 DO 56 J=JJ,NAT
61 IF(INMAT(J).EQ.0) GO TO 56
62 IAT=IAT+1
63 KAT(IAT)=J
64 DIST(IAT)=0.000
65 DO 55 K=1,3
66 R=COORD(I,K)-COORD(J,K)
67 55 DIST(IAT)=DIST(IAT)+R*R
68 DIST(IAT)=DSQRT(DIST(IAT))
69 56 CONTINUE
70 IF(LTEST.EQ.0) GO TO 58
71 WRITE(IWR,57)(KAT(J),DIST(J),J=1,IAT)
72 57 FORMAT(3('(',I2,')',D22.15,X))
73 GO TO 60
74 58 WRITE(IWR,59)(KAT(J),DIST(J),J=1,IAT)
75 59 FORMAT(4(2X,'(',I2,')',F12.8,2X))
76 60 CONTINUE
77 GO TO 20

```

```

C
65 LTEST=1
66 GO TO 67
67 LTEST=0
68 IAT=NAT-IATOMS
69 WRITE(IWR,68) IAT
70 68 FORMAT(/,1H,' COORDINATES OF THE ',I2,' DUMMY ATOMS.',/,
11H,7X,34('=','))
71 WRITE(IWR,69)
72 69 FORMAT(/,1H,' I',12X,'X',24X,'Y',24X,'Z',/)
73 DO 73 I=1,NAT
74 IF(INMAT(I).NE.0) GO TO 73
75 IF(LTEST.EQ.0) GO TO 71
76 WRITE(IWR,70) I,COORD(I,1),COORD(I,2),COORD(I,3)
77 70 FORMAT(X,I2,3(2X,D23.16))
78 GO TO 73
79 71 WRITE(IWR,72) I,COORD(I,1),COORD(I,2),COORD(I,3)
80 72 FORMAT(X,I2,3(6X,F12.8,7X))
81 73 CONTINUE
82 GO TO 20

```

```

C
80 LTEST=1
81 GO TO 82
82 LTEST=0
83 WRITE(IWR,83) IATOMS
84 83 FORMAT(/,1H,' COORDINATES OF THE ',I2,' ATOMS ',/,1H,7X,
129('=',))
85 WRITE(IWR,84)
86 84 FORMAT(/,1H,' I',3X,'Z',12X,'X',23X,'Y',24X,'Z',/)
87 DO 88 I=1,NAT
88 IF(INMAT(I).EQ.0) GO TO 88
89 IF(LTEST.EQ.0) GO TO 86
90 WRITE(IWR,85) I,INMAT(I),COORD(I,1),COORD(I,2),COORD(I,3)
91 85 FORMAT(X,I2,2X,I2,3(2X,D22.15))

```



```
4      GO TO 88
5      86 WRITE(IWR,87) I,INMAT(I),COORD(I,1),COORD(I,2),COORD(I,3)
6      87 FORMAT(X,I2,2X,I2,3(6X,F12.8,6X))
7      88 CONTINUE
8      GO TO 20
C
9      90 WRITE(IWR,91)
10     91 FORMAT(/,1H , '      ZMAT.'/,1H ,7X,5(' '),/)
11     WRITE(IWR,92)
12     92 FORMAT(X,' I',3X,' Z',5X,' J',10X,' BL',9X,' K',9X,' ALPHA',7X,' L',
13     19X,' BETA',/)
14     DO 96 I=1,NAT
15     IF(INMAT(I).NE.0) GO TO 93
16     WRITE(IWR,95) I,IZ(I,1),BOND(I),IZ(I,2),ALPHA(I),IZ(I,3),BETA(I)
17     95 FORMAT(X,I2,3X,' ',3(3X,I3,3X,F13.8))
18     GO TO 96
19     93 WRITE(IWR,94) I,INMAT(I),IZ(I,1),BOND(I),IZ(I,2),ALPHA(I),IZ(I,3),
20     1BETA(I)
21     94 FORMAT(X,I2,3X,I2,3(3X,I3,3X,F13.8))
22     96 CONTINUE
23     GO TO 20
C
24     100 DO 101 I=80,95
25     101 CALL ERAS(I)
26     CALL CMPRS
27     150 RETURN
28     END
```



```

1  SUBROUTINE ROTAT
2  REAL*8 COORD,XG,YG,TETA,TETA2,TRAV
3  REAL*8 U1,U2,U3,VP,R,DX,DY,DZ,UI
4  COMMON/DFILE/IRUF(4000)
5  COMMON/COORD/COORD(50,3),NAT,SCALX0,SCALY0,SCALX1,SCALY1
6  COMMON/PARAM/IXYZ,IDUMAT,IAXES,ITEST,IBOND,ISCRAT
7  COMMON/BOND/MBOUND(8,50)
8  DIMENSION IGROUP(50),IPRES(50),U1(3),U2(3),U3(3),VP(3),UI(3,3)
9  DATA IND/'N'/'

```

THIS SUBROUTINE COMPUTES A TWO DIMENSIONAL
ROTATION ROUND THE CENTRE OF GRAVITY.

```

10 IF(NAT.EQ.0) GO TO 105
11     TURN OFF MAIN MENU.
12     CALL OFF(1)
13     CALL OFF(2)
14     DO 1 I=4,23
15     1 CALL OFF(I)
16     NEW MENU.
17 1000 CALL SCAL(0.,0.,1023.,1023.)
18     CALL MENU(910.,280.,60.,70,'RETURN','GROUP','MOLEC')
19     ITEST=1
20 1001 CALL LPEN(IH,IT)
21     IF(IH.EQ.0) GO TO 1001
22     IF(ITEST.EQ.1) GO TO 1002
23     ITEST=1
24     IT=IT+69
25     GO TO (102,200,2) IT
26 1002 ITEST=0
27     GO TO 1001

```

ROTATION OF THE MOLECULE.

```

29 2 DO 3 I=70,72
30 3 CALL ERAS(I)
31     NEW MENU.
32     CALL MENU(910.,280.,40.,70,'RETURN','ANGLE')
33     CALL MENU(910.,360.,40.,72,'+ 5','+10')
34     CALL MENU(965.,360.,40.,74,'- 5',' -10')
35     COMPUTATION OF THE WANTED COORDINATES OF THE CENTRE
36     OF GRAVITY.
37 4 GO TO (5,10,15) IXYZ
38 5 J=1
39     K=3
40     GO TO 20
41 10 J=1
42     K=2
43     GO TO 20
44 15 J=3
45     K=2
46 20 XG=0.000
47     YG=0.000
48     DO 25 I=1,NAT

```



```

6      XG=XG+COORD(I,J)
7      25 YG=YG+COORD(I,K)
8      XG=XG/NAT
9      YG=YG/NAT
C      WAIT FOR USERS DECISION.
0      30 CALL LPEN(IH,IT)
1      IF(IH.EQ.0) GO TO 30
3      IF(ITEST.EQ.1) GO TO 31
5      ITEST=1
6      IT=IT-69
7      GO TO (100,55,50,45,40,35) IT
8      GO TO 30
9      31 ITEST=0
0      GO TO 30
1      35 TETA=-10.000
2      GO TO 70
3      40 TETA=-5.000
4      GO TO 70
5      45 TETA=10.000
6      GO TO 70
7      50 TETA=5.000
8      GO TO 70
9      55 IWR=4
0      IRD=4
1      TETA=0.000
2      WRITE(IWR,60)
3      60 FORMAT(1H,'INTRODUCE THE ANGLE OF ROTATION (FORMAT F).')
4      READ(IRD,65)TETA
5      65 FORMAT(F10.3)
6      70 TETA=TETA*3.14159265358979300/180.00
7      TETA2=DCOS(TETA)
8      TETA=DSIN(TETA)
9      DO 75 I=1,NAT
C      TRANSLATE AXES TO CENTRE OF GRAVITY.
0      COORD(I,J)=COORD(I,J)-XG
1      COORD(I,K)=COORD(I,K)-YG
C      ROTATION OF MOLECULE.
2      TRAV=COORD(I,J)*TETA2+COORD(I,K)*TETA
3      COORD(I,K)=COORD(I,K)*TETA2-COORD(I,J)*TETA
C      TRANSLATE BACK.
4      COORD(I,J)=TRAV+XG
5      75 COORD(I,K)=COORD(I,K)+YG
C      RECONSTRUCTION OF THE PICTURE.
6      CALL BEELD
C
7      90 GO TO 30
8      100 DO 101 I=70,75
9      101 CALL ERAS(I)
0      CALL CMPS
1      GO TO 1000
C
C      RETURN OF SUBROUTINE.
C
2      102 DO 103 I=70,72

```



```

3 103 CALL ERAS(I)
4 CALL EMPRS
5 105 RETURN

C
C ROTATION OF A GROUP.
C
C INITIALISATION.
C
6 200 IWR=4
7 IRD=4
8 DO 199 I=70,72
9 199 CALL ERAS(I)
10 DO 201 I=1,NAT
11 IPRES(I)=0
12 201 IGROUP(I)=0

C CONTEXTE DU GROUPE.
13 WRITE(IWR,202)
14 202 FORMAT(1H,'LE GROUPE EST-IL LIE A 1 ATOME FIXE? (Y, N= LIE A 2 AT
10MES FIXES)')
15 READ(IRD,203) IYES
16 203 FORMAT(A2)
17 IF(IYES.EQ.INO) GO TO 210
C CAS DU LE GROUPE EST LIE A 1 ATOME FIXE.
19 CALL SUBP(70)
20 CALL APNT(390.,940.,0,-8)
21 CALL TEXT('TOUCH THE FIXED ATOM OF THE BOND.')
```

```

22 CALL ESUB
23 CALL SUBP(71)
24 CALL OFF(71)
25 CALL APNT(390.,940.,0,-8)
26 CALL TEXT('TOUCH THE MOBILE ATOM OF THE BOND.')
```

```

27 CALL ESUB
28 IHIT=0
29 204 CALL LPEN(IH,IT)
C LECTURE DE L ATOME 'FIXE'.
30 IF(IH.EQ.0) GO TO 204
31 IHIT=IHIT+IH
32 IF(IHIT.LE.6) GO TO 204
33 IF(IT.LT.200.OR.IT.GT.249) GO TO 204
34 IFIX1=IT-199
35 CALL ERAS(70)
36 CALL ON(71)
37 IHIT=0
C LECTURE DE L ATOME 'MOBILE'.
38 205 CALL LPEN(IH,IT)
39 IF(IH.EQ.0) GO TO 205
40 IHIT=IHIT+IH
41 IF(IHIT.LE.6) GO TO 205
42 IF(IT.LT.200.OR.IT.GT.249) GO TO 205
43 IMOB1=IT-199
44 CALL ERAS(71)
C INITIALISATION : U ATOME DU GROUPE.
45 IFIX2=0
46 IGROUP(1)=IMOB1
47 IPRES(IMOB1)=1

```


4 NATGR=1
5 M1=IFIX1
6 M2=IMOB1
7 GO TO 215

C CAS DU LA GROUPE EST LIE A 2 ATOMES FIXES.

8 210 CONTINUE
9 CALL SUBP(70)
10 CALL APNT(390.,940.,0,-8)
11 CALL TEXT('TOUCH THE FIRST FIXED ATOM OF THE BOND.')12 CALL ESUB
13 CALL SUBP(71)
14 CALL OFF(71)
15 CALL APNT(390.,940.,0,-8)
16 CALL TEXT('TOUCH THE FIRST MOBILE ATOM OF THE BOND.')17 CALL ESUB
18 CALL SUBP(72)
19 CALL OFF(72)
20 CALL APNT(390.,940.,0,-8)
21 CALL TEXT('TOUCH THE SECOND FIXED ATOM OF THE BOND.')22 CALL ESUB
23 CALL SUBP(73)
24 CALL OFF(73)
25 CALL APNT(390.,940.,0,-8)
26 CALL TEXT('TOUCH THE SECOND MOBILE ATOM OF THE BOND.')27 CALL ESUB
28 INIT=0

C LECTURE DU 1 ATOME FIXE.

9 211 CALL LPEN(IH,IT)
10 IF(IH.EQ.0) GO TO 211
11 INIT=INIT+IH
12 IF(INIT.LE.6) GO TO 211
13 IF(IT.LT.200.OR.IT.GT.249) GO TO 211
14 IFIX1=IT-199
15 CALL ERAS(70)

C LECTURE DU 1 ATOME MOBILE.

9 CALL ON(71)
10 INIT=0
11 212 CALL LPEN(IH,IT)
12 IF(IH.EQ.0) GO TO 212
13 INIT=INIT+IH
14 IF(INIT.LE.6) GO TO 212
15 IF(IT.LT.200.OR.IT.GT.249) GO TO 212
16 IMOB1=IT-199
17 CALL ERAS(71)

C LECTURE DU 2 ATOME FIXE.

1 CALL ON(72)
2 INIT=0
3 213 CALL LPEN(IH,IT)
4 IF(IH.EQ.0) GO TO 213
5 INIT=INIT+IH
6 IF(INIT.LE.6) GO TO 213
7 IF(IT.LT.200.OR.IT.GT.249) GO TO 213
8 IFIX2=IT-199
9 CALL ERAS(72)


```

C          LECTURE DU 2 ATOME MOBILE.
3      CALL ON(73)
4      IHIT=0
5      214 CALL LPEN(IH,IT)
6          IF(IH.EQ.0) GO TO 214
7          IHIT=IHIT+IH
8          IF(IHIT.LE.6) GO TO 214
9          IF (IT.LT.200.OR.IT.GT.249) GO TO 214
1         IMOB2=IT-199
3         CALL ERAS(73)
4
C          INITIALISATION.
5      M1=IMOB1
6      M2=IMOB2
7      IGROUP(1)=IMOB1
8      IGROUP(2)=IMOB2
9      IPRES(IMOB1)=1
10     IPRES(IMOB2)=1
11     NATGR=2
C
C          RECHERCHE DES AUTRES ATOMES DU GROUPE.
2      215 CONTINUE
3         I=1
4         216 IAT=IGROUP(I)
5             IF(IAT.EQ.0) GO TO 220
6             J=1
7             217 IATBO=MBOUND(J,IAT)
8                 IF(IATBO.EQ.IFIX1) GO TO 218
9                 IF(IATBO.EQ.0) GO TO 219
10                IF(IATBO.EQ.IFIX2) GO TO 218
11                IF(IPRES(IATBO).EQ.1) GO TO 218
12                NATGR=NATGR+1
13                IGROUP(NATGR)=IATBO
14                IPRES(IATBO)=1
15            218 J=J+1
16                GO TO 217
17            219 I=I+1
18                GO TO 216
19            220 CONTINUE
C
C          READ THE ANGLE OF ROTATION.
5      221 WRITE(IWR,222)
6      222 FORMAT(1H,'INTRODUCE THE ANGLE OF ROTATION (FORMAT F).')
7          READ(IRD,223) TETA
8      223 FORMAT(F15.10)
C
C          CALCUL DE LA MATRICE DE TRANSFORMATION ORTHOGONALE U1,U2,U3
9      M3=IGROUP(3)
10     IF(IFIX2.EQ.0) M3=IGROUP(2)
11     CALL VEC(U1,COORD,M2,M1)
12     CALL VEC(U2,COORD,M3,M2)
13     CALL VPROD(VP,U1,U2)
14     R=DSQRT(1.000-(U1(1)*U2(1)+U1(2)*U2(2)+U1(3)*U2(3))*2)
15     DO 224 I=1,3
16         224 U2(I)=VP(I)/R
17     CALL VPROD(U3,U1,U2)
C
C          TRANSLATION DU GROUP
9      DX=COORD(M1,1)

```



```

0      DY=COORD(M1,2)
1      DZ=COORD(M1,3)
2      DO 225 I=1,NATGR
3      J=IGROUP(I)
4      COORD(J,1)=COORD(J,1)+DX
5      COORD(J,2)=COORD(J,2)+DY
6      225 COORD(J,3)=COORD(J,3)+DZ
C      TRANSFORMATION ORTHOGONALE INVERSE.
7      DO 230 I=1,NATGR
8      J=IGROUP(I)
9      DO 229 L=1,3
0      229 VP(L)=COORD(J,L)
1      COORD(J,1)=VP(1)*U1(1)+VP(2)*U1(2)+VP(3)*U1(3)
2      COORD(J,2)=VP(1)*U2(1)+VP(2)*U2(2)+VP(3)*U2(3)
3      COORD(J,3)=VP(1)*U3(1)+VP(2)*U3(2)+VP(3)*U3(3)
4      230 CONTINUE
C      ROTATION.
5      TETA=TETA*3.14159265358979300/180.000
6      TETA2=DCOS(TETA)
7      TETA=DSIN(TETA)
8      DO 240 I=1,NATGR
9      J=IGROUP(I)
0      TRAV=COORD(J,2)*TETA2+COORD(J,3)*TETA
1      COORD(J,3)=COORD(J,3)*TETA2+COORD(J,2)*TETA
2      240 COORD(J,2)=TRAV
C      TRANSFORMATION ORTHOGONALE.
3      DO 250 I=1,NATGR
4      J=IGROUP(I)
5      DO 249 L=1,3
6      249 VP(L)=COORD(J,L)
7      DO 250 K=1,3
8      250 COORD(J,K)=VP(1)*U1(K)+VP(2)*U2(K)+VP(3)*U3(K)
C      TRANSLATION INVERSE
9      DO 260 I=1,NATGR
0      J=IGROUP(I)
1      COORD(J,1)=COORD(J,1)+DX
2      COORD(J,2)=COORD(J,2)+DY
3      260 COORD(J,3)=COORD(J,3)+DZ
C
4      CALL BEELD
C
5      WRITE (IWR,251)
6      251 FORMAT(1H,'DO YOU WANT TO ROTATE THE SAME BOND ? (Y, N)')
7      READ (IRB,252) IYES
8      252 FORMAT(A2)
9      IF(IYES.NE.INQ) GO TO 221
10     GO TO 1000
11     END

```



```

1      SUBROUTINE SCHAAL
2      REAL*8 COORD
3      COMMON/DFILE/IRUF(4000)
4      COMMON/COORD/COORD(50,3),NAT,SCALX0,SCALY0,SCALX1,SCALY1,IATOMS
5      COMMON/PARAM/IXYZ,IDUMAT,IAXES,ITEST,IBOND,ISCRAT
6
7      C
8      C          THIS SUBROUTINE ALLOWS THE USER TO CHANGE THE SCALE
9      C          OF THE DISPLAY.
10     C
11     C
12     IF(NAT.EQ.0) GO TO 4
13     C
14     CALL SCAL(0.,0.,1023.,1023.)
15     C          TURN OFF MAIN MENU.
16     DO 1 I=1,10
17     1 CALL OFF(I)
18     DO 2 I=12,23
19     2 CALL OFF(I)
20     C          NEW MENU.
21     CALL MENU(910.,560.,60.,51,'RETURN','DECREASE','INCREASE')
22     C          WAIT FOR USERS DECISION.
23     3 CALL LPEN(IH,IT)
24     IF(IH.EQ.0) GO TO 3
25     IF(ITEST.EQ.1) GO TO 33
26     ITEST=1
27     IT=IT+50
28     GO TO (4,6,5) IT
29     33 ITEST=0
30     GO TO 3
31     C          DECREASE THE DIMENSION OF THE MOLECULE.
32     6 SCALX0=SCALX0*1.2
33     SCALY0=SCALY0*1.2
34     SCALX1=SCALX1*1.2
35     SCALY1=SCALY1*1.2
36     GO TO 7
37     C          INCREASE THE DIMENSION OF THE MOLECULE.
38     5 SCALX0=SCALX0*0.83333
39     SCALY0=SCALY0*0.83333
40     SCALX1=SCALX1*0.83333
41     SCALY1=SCALY1*0.83333
42     GO TO 7
43     C          RECONSTRUCTION OF THE PICTURE.
44     7 CALL BEELD
45     C
46     30 GO TO 3
47     C          ERASE LAST MENU.
48     4 CALL ERAS(51)
49     CALL ERAS(52)
50     CALL ERAS(53)
51     CALL CMRRS
52     RETURN
53     END

```



```

1      SUBROUTINE SCREAT
2      COMMON/PARAM/IXYZ,IDUMAT,IAXES,ITEST,IBOND,ISCRAT
3      COMMON/SCREAT/IATSCR(50)
4      DATA INO/'N'/'
5      DO 1 I=1,5
6      1 CALL OFF(I)
7      DO 2 I=7,15
8      2 CALL OFF(I)
9      DO 3 I=17,23
10     3 CALL OFF(I)
11     DO 50 I=1,50
12     50 IATSCR(I)=0
13     IWR=4
14     IRD=4
15     WRITE(IWR,4)
16     4 FORMAT(1H,'WOULD YOU LIKE TO SCREEN ONLY A FEW ATOMS ?',/.1H,
17     1'(Y=YES, N=NO)')
18     READ(IWR,5) IYES
19     5 FORMAT(A1)
20     IF(IYES.EQ.INO) GO TO 45
21     WRITE(IWR,10)
22     10 FORMAT(1H,'INDICATE THE WANTED ATOMS BY THEIR NUMBER (I). FORMAT
23     1(25(I2))')
24     READ(IRD,15)(IATSCR(I),I=1,25)
25     15 FORMAT(25(I3))
26     WRITE(IWR,20)
27     20 FORMAT(1H,'SOME MORE ATOMS ? (Y=YES, N=NO)')
28     READ(IWR,25) IYES
29     25 FORMAT(A1)
30     IF(IYES.EQ.INO) GO TO 40
31     WRITE(IWR,30)
32     30 FORMAT(1H,'INDICATE THE WANTED ATOMS BY THEIR NUMBER (I). FORMAT
33     1(25(I2))')
34     READ(IRD,35)(IATSCR(I),I=26,50)
35     35 FORMAT(25(I3))
36     C      OPTION: A FEW ATOMS
37     40 ISCRAT=1
38     CALL BEELD
39     RETURN
40     C      OPTION: THE WHOLE MOLECULE.
41     45 ISCRAT=0
42     CALL BEELD
43     RETURN
44     END

```



```

1      SUBROUTINE SCREEN
C
C      THIS SUBROUTINE PERMITS TO DISPLAY OR TO ERASE DUMMY ATOMS,
C      BONDS, AXES, AND TO PROJECT THE MOLECULE IN AN OTHER PLANE.
C
2      COMMON/DFILE/IBUF(4000)
3      COMMON/PARAM/IXYZ,IDUMAT,IXAXES,ITEST,IBOND,ISCRAT
C          TURN OFF MAIN MENU
4      CALL SCAL(0.,0.,1023.,1023.)
5      DO 20 I=1,13
6      20 CALL OFF(I)
7      DO 21 I=15,22
8      21 CALL OFF(I)
C          NEW MENU.
9      CALL MENU(910.,160.,60.,40,'ERASE','DUMMY','ERASE','ERASE')
0      CALL SUBP(50)
1      CALL APNT(910.,120.,0,-8)
2      CALL TEXT('  ATOMS')
3      CALL APNT(910.,140.,0,-8)
4      CALL TEXT('  DUMMY')
5      CALL APNT(910.,200.,0,-8)
6      CALL TEXT('  ATOMS')
7      CALL APNT(910.,260.,0,-8)
8      CALL TEXT('  BONDS')
9      CALL APNT(910.,320.,0,-8)
0      CALL TEXT('  AXES')
1      CALL ESUB
2      CALL MENU(910.,520.,60.,44,'RETURN','BONDS','AXES','PLANE ZY',
1      'PLANE YX','PLANE ZX')
C          WAIT FOR USERS DECISION.
3      1 CALL LPEN(IH,IT)
4      IF(IH.EQ.0) GO TO 1
6      IT=IT-39
7      GO TO (2,3,4,5,6,7,8,9,10,11) IT
8      GO TO 1
C          ERASE DUMMY ATOMS
9      2 IF(IDUMAT.EQ.0) GO TO 22
1      CALL ERAS(31)
2      CALL CMPRS
3      IDUMAT=0
4      22 GO TO 1
C          DISPLAY DUMMY ATOMS
5      3 IF(IDUMAT.EQ.1) GO TO 33
7      IDUMAT=1
8      CALL DUMAT
9      33 GO TO 1
C          ERASE BONDS
0      4 IF(IBOND.EQ.0) GO TO 41
2      CALL ERAS(34)
3      CALL CMPRS
4      IBOND=0
5      41 GO TO 1
C          ERASE AXES
6      5 IF(IXAXES.EQ.0) GO TO 51

```


TRAN IV V01C-03C
E=08K, UIC=[11,15]

SUN 14-MAY-78 16:49:35

PAGE 002

DK1:,SCREEN/LI:1/NOSP=DK1:SCREEN.

8 CALL ERAS(35)
9 CALL CMPRS
10 IAXES=0
1 51 GO TO 1

C DISPLAY BONDS
2 7 IF(IBOND.EQ.1) GO TO 77
4 IBOND=1
5 CALL BOND
6 77 GO TO 1

C DISPLAY AXES
7 8 IF(IAxes.EQ.1) GO TO 88
9 IAXES=1
10 CALL AXES
1 88 GO TO 1

C DISPLAY PLANE ZY
2 9 IXYZ=3
3 GO TO 12

C DISPLAY PLANE XY
4 10 IXYZ=2
5 GO TO 12

C DISPLAY PLANE XZ
6 11 IXYZ=1

C CONSTRUCTION OF THE PICTURE.
7 12 IF(ITEST.EQ.1) GO TO 16
9 CALL BEELD
10 15 ITEST=1
1 GO TO 1
2 16 ITEST=0
3 GO TO 1

C RETURN
4 6 DO 30 I=40,50
5 30 CALL ERAS(I)
6 CALL CMPRS
7 RETURN
8 END


```

1      SUBROUTINE TRANSL
2      REAL*8 COORD,DIST
3      COMMON/DFILE/IBUF(4000)
4      COMMON/COORD/COORD(50,3),NAT,SCALX0,SCALY0,SCALX1,SCALY1
5      COMMON/PARAM/IXYZ,IDUMAT,IAXES,ITEST,IBOND,ISCRAT
6      DATA INQ/'N'/
7
8      C          TURN OFF MAIN MENU.
9
10     DO 10 I=1,3
11     CALL OFF(I)
12     DO 20 I=5,23
13     CALL OFF(I)
14
15     C          NEW MENU.
16
17     CALL SCAL(0.,0.,1023.,1023.)
18     CALL MENU(910.,100.,40.,54,'RETURN',MOLEC,AXES)
19
20     C          WAIT FOR USERS DECISION.
21
22     30 CALL LPEN(IH,IT)
23     IF(IH.EQ.0) GO TO 30
24     IT=IT-53
25     GO TO (200,122,40) IT
26     GO TO 30
27
28     C          TRANSLATION OF AXES.
29
30     40 CALL SCAL(0.,0.,1023.,1023.)
31     CALL OFF(54)
32     CALL OFF(55)
33     CALL SUBP(57)
34     CALL APNT(910.,350.,1,8)
35     CALL TEXT(-1,'X')
36     CALL ESUB
37     CALL SUBP(59)
38     CALL APNT(960.,400.,1,8)
39     CALL TEXT(-1,'Y')
40     CALL ESUB
41     CALL SUBP(60)
42     CALL APNT(960.,350.,1,8)
43     CALL TEXT(-1,'V')
44     CALL ESUB
45     CALL SUBP(58)
46     CALL APNT(910.,400.,0,8)
47     CALL TEXT(-1,'W')
48     CALL ESUB
49     CALL MENU(910.,120.,20.,61,'RETURN')
50
51     50 CALL LPEN(IH,IT)
52     IF(IH.EQ.0) GO TO 50
53     IF(ITEST.EQ.1) GO TO 51
54     ITEST=1
55     IT=IT-56
56     SCALXY=ABS(SCALX0)+ABS(SCALX1)
57     DELTA=SCALXY/10.
58     GO TO (60,70,80,90,100) IT
59
60     51 ITEST=0
61     GO TO 50
62
63     60 SCALY0=SCALY0-DELTA
64     SCALY1=SCALY1-DELTA
65     GO TO 110

```


TRAN IV V01C=03C
E=08K, UIC=[11,15]

SUN 14-MAY-78 16:50:06

PAGE 002

DK1:,TRANSL/LI:1/NOSP=DK1:TRANSL.

```
4 70 SCALX0=SCALX0+DELTA
5 SCALX1=SCALX1+DELTA
6 GO TO 110
7 80 SCALY0=SCALY0+DELTA
8 SCALY1=SCALY1+DELTA
9 GO TO 110
0 90 SCALX0=SCALX0+DELTA
1 SCALX1=SCALX1+DELTA
2 GO TO 110
3 100 DO 101 I=57,61
4 101 CALL ERAS(I)
5 CALL CMPS
6 CALL ON(54)
7 CALL ON(55)
8 GO TO 30
```

C RECONSTRUCTION OF THE PICTURE

```
9 110 CALL BEELD
```

C

```
0 113 GO TO 50
1 120 CONTINUE
2 GO TO 30
```

C TRANSLATION OF MOLECULE.

```
3 122 CALL OFF(56)
4 CALL OFF(54)
```

C

```
5 CALL MENU(910,,340,,40,,61,'RETURN','DISTANCE')
6 CALL SUBP(63)
7 CALL APNT(920,,465,,0,-8)
8 CALL TEXT('1A')
9 CALL ESUB
0 CALL SUBP(57)
1 CALL APNT(910,,450,,1,8)
2 CALL TEXT(-1,'X')
3 CALL ESUB
4 CALL SUBP(59)
5 CALL APNT(960,,500,,1,8)
6 CALL TEXT(-1,'Y')
7 CALL ESUB
8 CALL SUBP(60)
9 CALL APNT(960,,450,,1,8)
0 CALL TEXT(-1,'V')
1 CALL ESUB
2 CALL SUBP(58)
3 CALL APNT(910,,500,,1,8)
4 CALL TEXT(-1,'W')
5 CALL ESUB
```

C

```
6 130 CALL LPEN(IH,IT)
7 IF(IH.EQ.0) GO TO 130
9 IF(ITEST.EQ.1) GO TO 131
1 ITEST=1
2 IT=IT+56
3 JXYZ=IXYZ+2
4 GO TO (135,136,137,138,190,140) IT
```


TRAN IV V01C=03C
E=08K, UIC=[11,15]

SUN 14-MAY-78 16:50:06

PAGE 003

DK1:,TRANSL/LI:1/NOBP=DK1:TRANSL.

```
5      131 ITEST=0
6      GO TO 130
C
7      135 DIST=1.000
8      GO TO 155
C
9      136 DIST=1.000
0      GO TO 150
C
1      137 DIST=-1.000
2      GO TO 155
C
3      138 DIST=-1.000
4      GO TO 150
C
5      140 IWR=4
6      IRD=4
7      WRITE(IWR,141)
8      141 FORMAT(1H,'DISPLACEMENT = +/- ?')
9      READ(IRD,142) DIST
0      142 FORMAT(F20.16)
1      WRITE(IWR,143)
2      143 FORMAT(1H,'HORIZONTAL DISPLACEMENT? (Y=YES, N=VERTICAL)')
3      READ(IRD,144) IYES
4      144 FORMAT(A2)
5      IF(IYES.EQ.'N') GO TO 155
6      GO TO 150
C
7      150 IF(JXYZ) 160,165,165
8      155 IF(JXYZ) 170,160,170
C
9      160 DO 161 I=1,NAT
0      161 COORD(I,1)=COORD(I,1)+DIST
1      GO TO 180
C
2      165 DO 166 I=1,NAT
3      166 COORD(I,2)=COORD(I,2)+DIST
4      GO TO 180
C
5      170 DO 171 I=1,NAT
6      171 COORD(I,3)=COORD(I,3)+DIST
C
7      180 CALL BEELD
8      GO TO 130
C
9      190 DO 191 I=57,63
0      191 CALL ERAS(I)
1      CALL CMPS
2      CALL ON(54)
3      CALL ON(56)
4      GO TO 30
C
5      ERASE MENU.
6      200 CALL ERAS(54)
7      CALL ERAS(55)
```


TRAN IV V01C-03C
E=08K, UIC=[11,15]

SUN 14-MAY-78 16:50:06

PAGE 004

DK1:,TRANSL/LI:1/NO SP=DK1:TRANSL.

8 CALL ERAS(56)
9 CALL CMPS
0 RETURN
1 END

TRAN IV V01C=03C
E=08K, UIC=[11,15]

SUN 14-MAY-78 16:50:35

PAGE 001

DK1:,VEC/LI:1/NOSP=DK1:VEC.

```
1      SUBROUTINE VEC(U,C,J,K)
      C
      C      COMPUTE THE DISTANCE R2 AND THE DIRECTION COSINES U(I)
      C      BETWEEN TWO POINTS.
      C
2      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
3      DIMENSION C(50,3),R(3),U(3)
4      R2=0.0D0
5      DO 10 I=1,3
6          R(I)=C(J,I)-C(K,I)
7      10 R2=R2+R(I)*R(I)
8      R2=DSQRT(R2)
9      DO 20 I=1,3
0      20 U(I)=R(I)/R2
1      RETURN
2      END
```


TRAN IV V01C=03C
E=08K, UIC=[11,15]

SUN 14-MAY-78 16:51:02

PAGE 001

DK1:,VPROD/LI:1/NOSP=DK1:VPROD.

```
1      SUBROUTINE VPROD(VP,X,Y)
   C
   C      VP = X CROSS Y
   C
2      IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
3      DIMENSION VP(3),X(3),Y(3)
4      VP(1)=X(2)*Y(3)-X(3)*Y(2)
5      VP(2)=X(3)*Y(1)-X(1)*Y(3)
6      VP(3)=X(1)*Y(2)-X(2)*Y(1)
7      RETURN
8      END
```



```

1      SUBROUTINE XYZPL
C
C      THIS SUBROUTINE DISPLAYS ALL THE ATOMS EXCEPT THE DUMMY ATOMS.
C
C
2      REAL*8 COORD,BONDL,ALPHA,BETA
3      COMMON/DFILE/IBUF(4000)
4      COMMON/COORD/COORD(50,3),NAT,SCALX0,SCALY0,SCALX1,SCALY1,IATOMS
5      COMMON/ZMAT/INMAT(50),IZ(50,3),BONDL(50),ALPHA(50),BETA(50)
6      COMMON/PARAM/IXYZ,IDUMAT,IXES,ITEST,IBOND,ISCRAT
7      COMMON/SCREAT/IATSCR(50)
8      DIMENSION ITAB(54)
9      DATA ITAB/'H','HE','LI','BE','B','C','N','O','F','NE','NA','MG',
1     'AL','SI','P','S','CL','AR','K','CA','SC','TI','V','CR','MN','FE',
2     'CO','NI','CU','ZN','GA','GE','AS','SE','BR','KR','RB','SR','Y',
3     'ZR','NB','MO','TC','RU','RH','PD','AG','CD','IN','SN','SB','TE',
4     'I','XE'/
C
C      IF(NAT.EQ.0) GO TO 4
C
2      CALL ERAS(35)
3      CALL ERAS(31)
4      CALL ERAS(34)
5      DO 5 I=1,NAT
6      ITAG=199+I
7      5 CALL ERAS(ITAG)
8      CALL ERAS(33)
9      CALL CMPSR
C      CONSTRUCTION OF A MINI REFERENCE SYSTEM.
0      CALL SUBP(33)
1      CALL SCAL(0.,0.,1023.,1023.)
2      CALL APNT(50.,900.,-1,-4)
3      CALL VECT(50.,0.)
4      CALL APNT(100.,880.,-1,-4)
5      CALL TEXT(-1,'W')
6      CALL APNT(50.,900.,-1,-4)
7      CALL VECT(0.,50.)
8      CALL APNT(44.,943.,-1,-4)
9      CALL TEXT(-1,'X')
0      IF(IXYZ.NE.3) GO TO 11
2      CALL APNT(60.,943.,-1,-4)
3      CALL TEXT('Z')
4      CALL APNT(120.,880.,-1,-4)
5      CALL TEXT('Y')
6      CALL APNT(50.,900.,-1,-6)
7      CALL VECT(-25.,25.)
8      CALL APNT(0.,850.,-1,-4)
9      CALL TEXT('X')
0      GO TO 31
1      11 CALL APNT(50.,900.,-1,-4,0,4)
2      CALL VECT(25.,25.)
3      CALL RDOT(0.,0.,-1,-4,0,1)
4      IF(IXYZ.NE.2) GO TO 21
6      CALL TEXT('Z')

```



```

7      CALL APNT(120.,880.,-1,-4)
8      CALL TEXT('Y')
9      CALL APNT(60.,943.,-1,-4)
0      CALL TEXT('X')
1      GO TO 31
2      21 CALL TEXT('Y')
3      CALL APNT(120.,880.,-1,-4)
4      CALL TEXT('X')
5      CALL APNT(60.,943.,-1,-4)
6      CALL TEXT('Z')
7      31 CALL ESUB
C
8      CALL SCAL(SCALX0,SCALY0,SCALX1,SCALY1)
C      DISPLAY OF THE MOLECULE.
9      IF(ISCRAT.EQ.1) GO TO 35
C
C      OPTION: THE WHOLE MOLECULE
1     DO 33 I=1,NAT
C         IF DUMMY ATOM
2     IF (INMAT(I).EQ.0) GO TO 33
C
4     ITAG=199+1
5     GO TO (10,20,30) IXYZ
C
C         10=PROJECTION ON THE PLANE 'ZX'
C         20=PROJECTION ON THE PLANE 'YX'
C         30=PROJECTION ON THE PLANE 'ZY'
C
6     20 Y=SNGL(COORD(I,1))
7     30 X=SNGL(COORD(I,2))
8     IF(IXYZ.EQ.2) GO TO 3
9     10 Y=SNGL(COORD(I,3))
0     IF(IXYZ.EQ.3) GO TO 3
1     X=SNGL(COORD(I,1))
C
4     3 CALL SUBP(ITAG)
5     CALL APNT(X,Y,1,6)
6     IF (INMAT(I).GT.54) GO TO 2
7     J=INMAT(I)
8     IATOM=ITAB(J)
9     CALL TEXT(ATOM)
0     GO TO 1
C
2     IWR=4
3     2 WRITE(IWR,13)
4     13 FORMAT(1H,'ATTENTION : TABLE <TAB> CONTAINS THE 54 FIRST SYMBOLS'
5     1,/, ' OF THE PERIODIC TABLE.')
6     CALL TEXT('*')
7     1 CALL ESUB
C
7     33 CONTINUE
8     4 RETURN
C
C      OPTION: A FEW ATOMS.

```


TRAN IV V01C=03C
E=08K, UIC=(11,15)

SUN 14-MAY-78 16:51:29

PAGE 003

DK1:XYZPL/LI:1/NDSP=DK1:XYZPL.

```
9      35 DO 45 I=1,NAT
0      IF(IATSCR(I).EQ.0) GO TO 46
2      J=IATSCR(I)
3      IF(INMAT(J).EQ.0) GO TO 45
5      ITAG=J+199
6      GO TO (40,50,60) IXYZ
7      50 Y=SNGL(COORD(J,1))
8      60 X=SNGL(COORD(J,2))
9      IF(IXYZ.EQ.2) GO TO 41
1     40 Y=SNGL(COORD(J,3))
2     IF(IXYZ.EQ.3) GO TO 41
4     X=SNGL(COORD(J,1))
5     41 CALL SUBP(ITAG)
6     CALL APNT(X,Y,1,6)
7     IF (INMAT(J).GT.54) GO TO 42
9     J=INMAT(J)
0     IATOM=ITAB(J)
1     CALL TEXT(IATOM)
2     GO TO 44
3     IWR=4
4     42 WRITE(IWR,43)
5     43 FORMAT(1H,'ATTENTION : TABLE <TAB> CONTAINS THE 54 FIRST SYMBOLS',
6           1,/, ' OF THE PERIODIC TABLE.')
7     CALL TEXT('**')
8     44 CALL ESUB
9     45 CONTINUE
0     46 RETURN
      END
```


01 SUBROUTINE ZERO(K)

C
C CETTE SOUSROUTINE GARDE LE NOMBRE DE CHIFFRES
C SIGNIFICATIFS SOUHAITES DES COORDONNEES ET MET
C LE RESTE A ZERO EN ARRONDISSANT.
C K : LE NOMBRE DE CHIFFRES SIGNIFICATIFS.
C

02 REAL*8 COORD,COORD1(3)
03 COMMON/COORD/COORD(50,3),NAT,SCALX0,SCALY0,SCALX1,SCALY1,IATOMS
04 DIMENSION A(21),ACO(21)
05 DATA ANUL/'0'/
06 TEST=0.99*0.1**K
07 M=K+6
08 DO 30 I=1,NAT
09 DO 30 J=1,3
10 IF(COORD(I,J)) 5,7,6
11 5 COORD(I,J)=COORD(I,J)-0.500*0.100**K
12 GO TO 7
13 6 COORD(I,J)=COORD(I,J)+0.5*0.1**K
14 7 CONTINUE
15 ENCODE(21,10,A) COORD(I,J)
16 10 FORMAT(F21.16)
17 DECODE(21,15,A) ACO
18 15 FORMAT(21A1)
C
19 DO 20 L=M,21
20 ACO(L)=ANUL
C
21 ENCODE(21,15,COORD1) ACO
22 DECODE(21,25,COORD1) COORD(I,J)
23 25 FORMAT(F21.16)
24 IF(DABS(COORD(I,J)).LE.TEST) COORD(I,J)=0.000
26 30 CONTINUE
27 RETURN
28 END

X

BUMP



0 0 3 2 1 2 5 1 3

*FM B16/1979/06

